P. Holzer

1972

Zur Theorie von Supraleitern mit magnetischen Verunreinigungen

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades

der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik der

Johann Wolfgang Goethe-Universität

zu Frankfurt am Main

von

Peter Holzer

aus Sexten in Südtirol

Frankfurt am Main

Oktober 1972

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41523706_0026

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik der
Johann Wolfgang von Goethe Universität Frankfurt/Main

Dekan:	Professor W. Jung
Erster Berichterstatter:	Professor Dr. P. Fulde
Zweiter Berichterstatter:	Professor Dr. H. Thomas

Tag der mündlichen Prüfung: 1. Dezember 1972

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Einleitung

Magnetische Verunreinigungen haben einen drastischen Einfluß auf Supraleiter. Abrikosov und Gorkov (1) zeigten,daß die Reduktion der Übergangstemperatur durch folgenden Ausdruck gegeben ist:

$$\ln(T_c/T_{c0}) = -\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi T_c \tau_s}\right) + \psi\left(\frac{1}{2}\right)$$

τ_s ist die Spin-flip Streuzeit und $\psi(x)$ die Digammafunktion. τ_s^{-1} ist proportional zur Verunreinigungskonzentration. Außerdem fanden sie,daß es Konzentrationen gibt, bei denen die Lücke im Anregungsspektrum verschwindet,obwohl $T < T_c$ ist und die Paarkorrelationsfunktion einen endlichen Wert hat. Auch im Falle eines Supraleiters ohne magnetische Verunreinigungen aber mit äußerem Magnetfeld muß man dieselbe Unterscheidung zwischen Ordnungsparamter und Energielücke machen.
Die nichtmagnetischen Verunreinigungen haben demgegenüber einen kleinen Einfluß auf den Supraleiter. Die normale Verunreinigungswechselwirkung ist invariant unter Zeitumkehr und die Cooper-Paare zwischen zeitumgekehrten Zuständen haben daher eine unendliche Lebensdauer. Wenn aber eine Wechselwirkung die Zeitinvarianz-Symmetrie bricht, resultiert eine endliche Lebensdauer der Cooper-Paare. Dieser Paarbrechungseffekt wurde eingehend untersucht (2), (3),(4).
Abrikosov und Gorkov setzen in ihren Rechnungen

voraus, daß der Grundzustand der Verunreinigungen $2J + 1$ - fach entartet ist. Den Einfluß der durch das umgebende Kristallfeld aufgespaltenen Niveaus auf die Paarbrechung untersuchten zuerst Fulde et al. (5) für den Fall geringer Verunreinigungskonzentration. In der Verallgemeinerung auf endliche Konzentrationen

untersuchten Keller und Fulde (6) die Reduktion der Übergangstemperatur als Funktion der Verunreinigungskonzentration mit der Stärke der Kristallfeldaufspaltung als Parameter.
Wir wollen in dieser Arbeit das Verhalten des Ordnungsparamters Δ als Funktion der Temperatur T und der Verunreinigungskonzentration für verschiedene Niveauaufspaltungen untersuchen. Weiter wollen wir die Zustandsdichte $N(\omega)$ des Supraleiters berechnen unter dem Einfluß der einem Kristallfeld unterliegenden magnetischen Verunreinigungen.
Die Zustandsdichte kann verwendet werden, um den Tunnelstrom als Funktion der Spannung zu berechnen und damit auch die Leitfähigkeit (7), (8), (9).
Die Kenntnis der Zustandsdichte erlaubt die Berechnung weitere physikalischer Größen, wie z.B. die spezifische Wärme und das kritische magnetische Feld H_c (siehe z.B. (10)) und damit im Vergleich mit dem Experiment andere noch unbekannte Größen, wie die Größe der Kristallfeldaufspaltung, festzulegen.
Im 1. Teil unserer Untersuchungen wollen wir diese Rechnungen für die große Reihe der schwach koppelnden Supraleiter machen, die ja durch eine hohe Debeye-Temperatur gekennzeichnet sind. Wir werden zeigen, daß sich die Kristallfeldniveaus in der Zustands-

dichte widerspiegeln und werden sehen, daß sie bei der Energie $\omega \approx \Delta$ ein Maximum hat und bei $\omega = \Delta \pm n\delta$ Struktur hat, wenn δ die Kristallfeldaufspaltung und n eine ganze Zahl ist. Weiter werden wir erkennen, daß der Bereich, in dem Δ linear mit der Konzentration abnimmt, mit der Größe der Aufspaltung wächst für den Fall, daß der Grundzustand und der angeregte Zustand je ein Singulett sind.

Im 2. Teil werden wir den Einfluß von magnetischen und nichtmagnetischen Verunreinigungen ohne Kristallfeldaufspaltung auf stark koppelnde Supraleiter untersuchen. Dadurch, daß bei den stark koppelnden Supraleitern wie z.B. Pb oder Hg die Zustandsdichte der Phononen bei kleinen Energien sehr groß ist, ist es nicht mehr adäquat, die Elektron-Phonon Wechselwirkung, die zur Supraleitung führt, durch ein mittleres, frequenzunabhängiges Wechselwirkungs-Potential zwischen den Leitungselektronen zu approximieren. Eine Konsequenz ist z.B. das gegenüber der BCS-Theorie geänderte Verhältnis $\Delta(0)/kT_c$

Auch das kritische magnetische Feld, als Funktion von T verhält sich anders als das von schwach koppelnden Supraleitern. (11), (12). Die Tunnelleitfähigkeit besitzt Struktur bei typischen Phononenenergien, (8),(9),(13),(14), (15),(16).

I

Die Seltenen Erden sind eine Gruppe von 15 Elementen mit den Ordnungszahlen von Z = 57 bis Z = 71. Sie sind meist 3 - wertig. Alle 3 - wertigen Ionen haben die Edelgasschale von Xenon von 54 Elektronen und dazu N 4f Elektronen, wobei N von o (La^{3+}) bis 14 (Lu^{3+}) reicht.

Der Zustand eines freien Ions wird durch den Gesamtspin S, den Bahndrehimpuls L, den Gesamtdrehimpuls J und die Projektion J_z festgelegt. J,L,S werden nach der Hund'schen Regel bestimmt, so daß L und S die maximal möglichen Werte haben und $J = L - S$ ist, wenn die Schale nicht halb gefüllt ist und $J = L + S$, wenn die Schale mehr als halb gefüllt ist. In Tabelle 1 sind einige Daten für die positiv 3 - wertigen Ionen der Seltenen Erden zusammengestellt (17),(18).

Die 2J + 1 fache Entartung der freien Ionen wird durch den Einbau in einen Kristall durch die elektrischen Felder der Nachbarionen ganz oder teilweise aufgehoben (Stark-Effekt). Für Einzelheiten sei auf die Literatur verwiesen (19),(2o),(21),(22).

Durch Kramers Theorem läßt sich über die Elemente mit ungerader Anzahl von 4f Elektronen bereits eine Aussage über die Entartung machen. Im einzelnen sagt das Theorem, daß Systeme mit ungerader Anzahl von Elektronen, auf die rein elektrische Felder wirken, keine Energieniveaus haben kann, die weniger als 2 fach entartet sind. Die 2 fache Entartung kann durch Magnetfelder aufgehoben werden. Als kurze Zusammenfassung möge folgendes dienen:

Tabelle 1

Z		N	Grund Zustand	$2J_g$	1. Angeregter Zustand in cm^{-1}
57	La	0	$^1S_0$	0	2200
58	Ce	1	$^2F_{5/2}$	4.28	2100
59	Pr	2	$^3H_4$	6.40	1900
60	Nd	3	$^4I_{9/2}$	6.54	1600
61	Pm	4	$^5I_4$	4.80	1000
62	Sm	5	$^6H_{5/2}$	1.43	400
63	Eu	6	$^7F_0$	0	30000
64	Gd	7	$^8S_{7/2}$	14.00	2000
65	Tb	8	$^7F_6$	18.00	
66	Dy	9	$^6H_{15/2}$	20.00	
67	Ho	10	$^5I_8$	20.00	
68	Er	11	$^4I_{15/2}$	18.00	6500
69	Tm	12	$^3H_6$	14.00	
70	Yb	13	$^2F_{7/2}$	8.00	10000
71	Lu	14	$^1S_0$	0.	

1) Ungerade Anzahl von Elektronen, J halbzahlig

a) Nichtkubische Symmetrie des Feldes: Alle Niveaus sind 2 fach entartet.

b) Kubische Symmetrie: Es können 2 - und 4 fach entartete Niveaus auftreten und zwar

J =	1/2	3/2	5/2	7/2	9/2	11/2	13/2	15/2	17/2
2 fach	1	0	1	2	1	2	3	2	3
4 fach	0	1	1	1	2	2	2	3	3
gesamt	1	1	2	3	3	4	5	5	6

2) Gerade Anzahl von Elektronen, J geradzahlig

a) Nichtkubische Symmetrie des Feldes: Es können nur Singuletts und Doubletts vorkommen. Alle Niveaus sind nicht entartet, wenn es eine mindestens dreizählige Achse gibt.

b) Kubische Symmetrie: Es könen 2 fach, 3 fach entartete Niveaus und Singuletts auftreten:

J =	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1 fach	1	-	-	1	1	-	2	1	1	2
2 fach	-	-	1	-	1	1	1	1	2	1
3 fach	-	1	1	2	2	3	3	4	4	5
gesamt	1	1	2	3	4	4	6	6	7	8

Aus Tabelle 1 letzte Spalte sehen wir, daß der 1. angeregte Zustand zu einem vom Grundzustand verschiedenem J um 10^3 °K über dem Grundzustand liegt. Die durch das Kristallfeld erzeugte Aufspaltung des Grundzustandes des freien Ions liegt i.a. bei 10^0 - 10^2 °K, so daß wir obige Anregungsniveaus vernachlässigen können.

Man kann allgemein das zum Kristallfeld gehörige Potential schreiben als

$$V(r,\vartheta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} B_{lm}\, r^l\, Y_l^m(\vartheta,\varphi)$$

mit freien Entwicklungsparametern B_{lm}. Für den Fall kubischer Symmetrie wurde die Lage der durch das Feld aufgespaltenen Energieniveaus als Funktion dieser Parameter von Lea, Leask und Wolf (23) berechnet. Es existieren verschiedene experimentelle Methoden, um die Kristallfeldaufspaltung zu messen. Die direkteste Methode ist wohl die Streuung mit thermischen Neutronen (24),(25),(26),(27). Messungen der spezifischen Wärme nutzen die Tatsache aus, daß Niveauaufspaltung zu Schottky- Anomalien führt.(28) Eine weitergehende Zusammenfassung findet man z.B. in (29),(5),(3o).

II

J. Keller und P. Fulde (6) studierten Supraleiter mit Verunreinigungen aus der Gruppe der Seltenen Erden, deren entarteter Grundzustand durch das Kristallfeld aufgespalten wurde und berechneten die Sprungtemperatur als Funktion der Verunreinigungskonzentration. Sie fanden, daß sich die Verunreinigungen mit magnetischemGrundzustand qualitativ verschieden verhielten von solchen mit nichtmagnetischem Grundzustand.
Wir stellen uns die Aufgabe, den Effekt bei endlichem Ordnungsparameter Δ , also nicht bei T_c zu studieren, und zwar wollen wir den Ordnungsparameter Δ als Funktion der Temperatur und der Verunreinigungskonzentration berechnen und die Zustandsdichte $N(\omega)$. Von Fulde, Luther und Hirst (5) wurde vorgeschlagen, die Zustandsdichte in Tunnelmessungen (7) zu benutzen, um die Kristallfeldaufspaltung zu messen. Wir werden sehen, daß das gut möglich sein sollte.
Die mathematische Methode, die in der ARbeit verwendet wird, stützt sich auf ein Verfahren, das von Abrikosov (31) vorgeschlagen wurde. Sie besteht darin, daß die Spinoperatoren durch Fermioperatoren ausgedrückt werden. Eine Übersicht über einige auftretende Probleme gibt der Artikel von Duke und Silverstein (32). Diese Methode wurde auch in (5),(6),(29),(3o) verwendet und wir benutzen dieselbe Bezeichnungsweise wie(6). Wie Keiter (33) bemerkt, gilt das linked-cluster-Theorem nicht, sondern alle Selbstenergiediagramme müssen durch (1 + G) dividiert

werden, wobei G die Summe aller geschlossenen Diagramme ist. Dieser Faktor ist temperatur- und konzentrationsabhängig. Er läßt sich formal als Potenzreihe im Wechselwirkungsmatrixelement auffassen und liefert KOrrekturen höherer Ordnung. Deshalb wird er in unseren Rechnungen weggelassen.
Wir nehmen als Wechselwirkungshamilonoperator zwischen Leitungselektronen und Verunreinigungen an:

$$H_{ex} = -2 J_{ex} (g-1) \underset{\sim}{J} \cdot \underset{\sim}{s} \qquad [1]$$

J_{ex} ist die Austauschwechselwirkungskonstante
g ist der Lande' Faktor
$\underset{\sim}{J}$ ist der Gesamtdrehimpuls der Verunreinigungen
$\underset{\sim}{s}$ ist die Spindichte der Elektronen
Wir behandeln den reinen Supraleiter im Rahmen der BCS-Theorie, in der die effektive el-el Wechselwirkung durch ein konstantes Potential V beschrieben wird.
Wir benutzen den Nambu-Formalismus (34),(4) und schreiben die Greenfunktion des Supraleiters als 2 x 2 Matrix, deren nicht diagonale Elemente mit den anomalen Greenfunktionen von Gorkov (35) identisch sind.
Als Ansatz schreiben wir:

$$G(p, i\omega_m) = \left(i\tilde{\omega}_m - \varepsilon_p \rho_3 - \tilde{\Delta}_m \rho_1 \right)^{-1}$$

wobei die renormalisierte Matsubara-Frequenz $\tilde{\omega}_m$ und der renormalisierte Ordnungsparameter $\tilde{\Delta}_m$ aus der Dyson-Gleichung bestimmt werden sollen:

$$\left[G(i\omega_m, p) \right]^{-1} = \left[G_0(p, i\omega_m) \right]^{-1} - \Sigma(p, i\omega_m) \qquad [2]$$

$G_0(p, i\omega_m)$ ist definiert durch

$$G_0(p, i\omega_m) = \left(i\omega_m - \varepsilon_p \rho_3 - \Delta \rho_1 \right)^{-1} \quad [4]$$

$$\omega_m = 2\pi T \left(m + \tfrac{1}{2}\right)$$

ρ_i sind die Paulimatizen

$\varepsilon_p = v_F (p - p_F)$ ist die kinetische Energie, gemessen von der Fermikante

Δ ist selbstkonsistent zu bestimmen aus

$$\Delta = -V \cdot T \sum_{|\omega_m| < \omega_D} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \, Tr \left(\rho_1 \, G(p, i\omega_m) \right) \quad [5]$$

ω_D ist die Abschneidefrequenz (35), $Tr = Sp_{mr}$

Durch die übliche Ersetzung

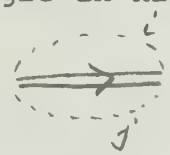
$$\int d^3p \longrightarrow \int N(\varepsilon) \, d\varepsilon \longrightarrow N(0) \int d\varepsilon$$

folgt

$$\Delta = N(0) \, V \cdot \pi \cdot T \sum_{|\omega_n| < \omega_D} \frac{\tilde{\Delta}_n}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}_n^2}} \quad [6]$$

Für die Selbstenergie in niedrigster Ordnung haben wir

$$\Sigma(p, i\omega_m) = \quad [7]$$



wobei die Doppellinie die volle Greenfunktion des Supraleiters ist und i,j (gebrochene Linien) die nackten Propagatoren der Verunreinigungen sind:

$$D_i(\omega_m) = \left(i\omega_m - \lambda - \delta_i \right)^{-1} \quad [8]$$

δ_i = Aufspaltungsenergie

λ = "chemisches Potential"

Mit [2], [3], [7] erhalten wir

$$\tilde{i\omega}_m = i\omega_m - \lim_{\lambda \to \infty} \frac{\exp(\lambda/T)}{C} \sum_{ij} \frac{1}{2\tau_{ij}} \cdot T^2 \times$$

$$\times \sum_{\omega_1, \omega_m} \frac{\tilde{\omega}_m}{\sqrt{\tilde{\omega}_m^2 + \tilde{\Delta}_m^2}} \cdot D_j(\omega_1) \cdot D_i(\omega_1 + \omega_n - \omega_m) \quad [9]$$

$$\tilde{\Delta}_m = \Delta + \lim_{\lambda\to\infty} \frac{\exp(\lambda/T)}{C} \sum_{ij} \frac{1}{2\tau_{ij}} T^2 \times$$

$$\times \sum_{\omega_n,\omega_m} \frac{\tilde{\Delta}_m}{\sqrt{\tilde{\omega}_m^2 + \tilde{\Delta}_m^2}} \cdot D_j(\omega_n) \cdot D_i(\omega_n + \omega_m - \omega_m) \qquad [10]$$

Die Streuraten τ_{ij}^{-1} sind definiert durch

$$\tau_{ij}^{-1} = \tau^{-1} |\langle i|\underset{\sim}{J}|j\rangle|^2$$

mit

$$\tau^{-1} = 2\pi n N(0) J_{ex}^2 (g-1)^2$$

und n als Verunreinigungskonzentration.

$$C = \sum_i \exp(-\delta_i/T)$$

i und j laufen über alle Verunreinigungszustände.
Wenn wir die Summationen in 9 und 10 ausführen, erhalten wir

$$\tilde{\omega}_m = \omega_m + \frac{1}{2\tau} T \sum_{\omega_m} R(\omega_m, \omega_m) \frac{\tilde{\omega}_m \, \mathrm{sign}(\omega_m)}{\sqrt{\tilde{\omega}_m^2 + \tilde{\Delta}_m^2}} \qquad [11]$$

$$\tilde{\Delta}_m = \Delta - \frac{1}{2\tau} T \sum_{\omega_m} R(\omega_m, \omega_m) \frac{\tilde{\Delta}_m \, \mathrm{sign}(\omega_m)}{\sqrt{\tilde{\omega}_m^2 + \tilde{\Delta}_m^2}} \qquad [12]$$

mit

$$R(\omega_m, \omega_m) = -\sum_{ij} \frac{|\langle i|\underset{\sim}{J}|j\rangle|^2 \delta_{ij} (n_i - n_j) \, \mathrm{sign}(\omega_m)}{(\omega_m - \omega_m)^2 + \delta_{ij}^2} \qquad [13]$$

und

$$\delta_{ij} = \delta_i - \delta_j \,, \qquad n_i = \exp(-\delta_i/T)/C \qquad [14]$$

Es ist zweckmäßig, Übergänge zwischen verschiedenen Multipletts durch eine Matrix $K_{\mu\nu}$ zusammenzufassen:

$$K_{\mu\nu} = \sum_{\substack{i\in\mu \\ j\in\nu}} |\langle i|\underset{\sim}{J}|j\rangle|^2 \qquad [15]$$

wobei μ,ν verschiedene Energieniveaus sind mit $\varepsilon_\mu - \varepsilon_\nu \neq 0$
In (6) erwies es sich als zweckmäßig, die Sprungtemperatur T_c/T_{co} in einem solchen Maßstab als Funktion der Verunreinigungkonzentration zu zeichnen, daß die Anfangssteigung unabhängig vom speziellen Niveausystem und gleich -1 war. Das kann man erreichen, wenn man T_c/T_{co} als Funktion von $(\tau_m T_{co})^{-1}$ aufträgt mit

$$\frac{1}{\tau_m T_{co}} = -\pi T_{co} \sum_{\omega_m>0} \sum_{\omega_m} \sum_{ij} \left[\frac{1}{\omega_m^2} + \frac{1}{\omega_m \omega_m}\right] \times$$

$$\times \frac{1}{\tau_{ij}} \frac{\delta_{ij}(n_i - n_j)\, \mathrm{sign}(\omega_m)}{(\omega_m - \omega_m)^2 + \delta_{ij}^2}\Bigg|_{T=T_{co}} \qquad [16]$$

Wie man leicht sieht, ist $(\tau_m T_{co})^{-1} \sim n$
Wir werden uns dieser Konvention anschließen.
Die Gleichungen [9] und [10] lassen sich durch die Definition

$$y_n \equiv \frac{\tilde{\Delta}_n/\Delta}{\tilde{\omega}_n} \qquad [17]$$

zu folgender Gleichung zusammenfassen:

$$\left[\omega_n + \frac{1}{2\tau} T \sum_{\omega_m} R(\omega_n,\omega_m) \frac{1}{\sqrt{1+\Delta^2 y_m^2}}\right] y_n =$$

$$= 1 - \frac{1}{2\tau} T \sum_{\omega_m} R(\omega_n,\omega_m) \frac{y_m}{\sqrt{1+\Delta^2 y_m^2}} \qquad [18]$$

Wenn wir die Beziehung aus der BCS-Theorie

$$(N(0)\cdot V)^{-1} = \ln\left(T_c/T_{c0}\right) + \pi T_c \sum_{|\omega_n|<\omega_D} \frac{\mathrm{Sign}(\omega_n)}{\omega_n} \qquad [19]$$

benutzen, so folgt für die Konsistenzgleichung [6]

$$\ln\left(T/T_{c0}\right) = 2\pi T \sum_{\omega_n>0} \left\{ \frac{y_n}{\sqrt{1+\Delta^2 y_n^2}} - \frac{1}{\omega_n} \right\} \qquad [20]$$

Gleichung [18] und [20] haben wir numerisch iteriert, um $\Delta(T,n)$ zu erhalten. Zur Berechnung der Größe $(\tau_n T_{c0})^{-1}$ danken wir Herrn J. Keller für die Überlassung seines Unterprogramms. Die Werte der Matrix $K_{\mu\nu}$ wurden aus (6) genommen.

III

Die Zustandsdichte erhalten wir aus

$$N(\omega) = \frac{1}{2\pi} \operatorname{Im} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \operatorname{Tr}\left(G(p, \omega_m)\right)\Big|_{i\omega_m = \omega + i0^+} \qquad [21]$$

(siehe z.B. (3),(4)) zu

$$N(\omega) = N(0) \operatorname{Re} \frac{\tilde{\omega}_m}{\sqrt{\tilde{\omega}_m^2 + \tilde{\Delta}_m^2}}\Big|_{i\omega_m = \omega + i0^+} \qquad [22]$$

$$= N(0) \operatorname{Re} \frac{1}{\sqrt{1 + \Delta^2 y_m^2}}\Big|_{i\omega_m = \omega + i0^+} \qquad [23]$$

[22] und [23] sind so zu verstehen, daß die Funktionen $\tilde{\omega}_m$, $\tilde{\Delta}_m$, y_m, die auf der imaginären Achse nur an den diskreten Punkten $\omega_m = 2\pi T(m + \frac{1}{2})$ definiert sind, fortgesetzt werden sollen auf die relle Achse. Die Fortsetzung muß so sein, daß die Greenfunktion G analytisch ist in der ganzen oberen Halbebene, wenn von $\operatorname{Im}(z) > 0$ fortgesetzt wird und analytisch in der unteren Halbebene, wenn von $\operatorname{Im}(z) < 0$ fortgesetzt wird.
Aus der Spektraldarstellung von $G(p, \omega_m)$

$$G(p, \omega_m) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(p, x)}{x - i\omega_m} dx \qquad [24]$$

mit der reellen Spektralfunktion ρ folgt

$$G(\omega_m) = G^*(-\omega_m) \qquad [25]$$

[25] liefert die Eigenschaften von G in der unteren Halbebene.

Das eben skizzierte Verhalten von G in der komplexen Ebene überträgt sich auf $y(i\omega_n) \equiv y_n$.
Durch numerische Iteration von [18] war y_n an endlich vielen Stellen $i\omega_n$ auf der imaginären Achse bekannt. Da diese Werte auf die reelle Achse fortgesetzt werden mußten, mußte die Funktion y_n durch einen analytischen Ausdruck $S(i\omega_n)$ approximiert werden, der dann durch $i\omega_n \to \omega + i\delta^+$ fortgesetzt werden komnte. Weil die Greenfunktion in entsprechenden Halbebenen Singularitäten haben konnte, verwendeten wir die Pade'-approximation . Sie besteht i.a. darin, eine Funktion durch einen Quotienten von Polynomen zu approximieren

$$S(z) = \frac{P(z)}{Q(z)} = \frac{\sum_{i=0}^{p} a_i z^i}{\sum_{i=0}^{q} b_i z^i} \qquad [26]$$

p,q ganz
Dieser Ansatz ist zweckmäßig, da er erlaubt, nicht nur die Funktion y_n bei kleinen ω_n sondern auch für $\omega_n \to \infty$ in ihrem Verhalten festzulegen. Außerdem erlaubt der Ansatz, Singularitäten im unphysikalischen Blatt der komplexen Ebene durch Nullstellen des Nenners zu simulieren.
Wenn nun S(z) an bestimmten Stellen bekannt ist, ergibt [26] ein System von linearen Gleichungen für die UNbekannten a_i , b_i.
Eine einführende Übersicht über die bisher bekannten Eigenschaften der Pade'-approximation gibt das Buch von Baker Jr. und Gammel (37).
Unter Umständen kann die Funktion y_n Schnitte auf der reellen Achse haben. Man kann das einfach sehen im Fall verschwindender Kristallfeldaufspaltung.

Die Gleichung [18] lautet für diesen Fall

$$y_m\left(\omega_m + \frac{1}{\tau}\,\frac{1}{\sqrt{1+y_m^2\Delta^2}}\right) = 1 \qquad [27]$$

fortgesetzt erhalten wir

$$y(\omega)\cdot\left[\omega + \frac{1}{\tau}\,\frac{1}{\sqrt{y^2(\omega)\Delta^2-1}}\right] = -1 \qquad [28]$$

Für geeignete Werte von τ^{-1} und Δ hat diese Gleichung für kleine ω reelle Lösungen mit $y^2\Delta^2 > 1$
Da die Zustandsdichte

$$N(\omega) = N(0)\ \mathrm{Re}\ \frac{1}{\sqrt{1-y^2\Delta^2}} \qquad [29]$$

ist, ergibt das $N(\omega)=0$ für $0 \le \omega \le \omega_g$, wobei ω_g die Schranke ist, bei der y komplex wird.(1o)
Es ist bekannt (37) , daß die Pade'-approximation einen Schnitt i.a. durch eine Serie von Polen darstellt. das ist aber schon qualitativ ein falsches Verhalten für $y(\omega)$
Um dieser Schwierigkeit zú entgehen, definierten wir eine Paarbrechungsfunktion $f(\omega_m)$ durch

$$y_m\left(\omega_m + \frac{1}{\tau}\,f(\omega_m)\,\frac{1}{\sqrt{1+\Delta^2 y_m^2}}\right) = 1 \qquad [30]$$

$f(\omega_m)$ kann aus [3o] berechnet werden wenn y_n aus [18] bekannt ist. $f(\omega_m)$ ist ein Maß für die Abweichung vom Abrikosov-Fall (27) auf Grund des Kristallfeldes. Es ist $f(\omega_m)$ =1 für verschwindende Kristallfeldaufspaltung.
Gleichung [3o] auf die reelle Achse fortgesetzt, lautet

$$y(\omega)\cdot\left[\omega+\frac{1}{\tau}f(-i\omega)\frac{1}{\sqrt{y^2(\omega)\Delta^2-1}}\right)=-1 \quad [31]$$

$f(\omega_m)$ aus [30] sollte frei von Schnitten sein und somit gut durch Pade' approximiert werden können. Damit konnte $f(\omega_m)$ auf die relle Achse fortgesetzt und in [30] eingesetzt werden, wodurch $y(\omega)$ auf der rellen Achse berechnet werden konnte für die Zustandsdichte [29]. Das Verfahren war natürlich gut für sehr kleine Aufspaltungen, für größere war es aber unbefriedigend, da es in vielen Fällen nicht möglich war, mit einer beschränkten Anzahl von Koeffizienten eine Approximation für $f(\omega_m)$ zu finden, die frei von Singularitäten auf dem physikalischen Blatt war. Unseres Erachtens liegt der Grund darin, daß nicht auszuschließen ist, daß $y(\omega)$ noch andere Schnitte hat als die, die durch [31] simuliert werden. Auch konnte nicht entschieden werden, ob nicht die Struktur von $y(\omega)$ bei endlicher Kristllfeldaufspaltung vollkommen anders ist als durch den Ansatz [30] bzw. [31] vermutet, so daß $f(\omega_m)$ für eine Pade'-approximation schlecht geeignet wäre.
Wir haben daher die Gleichungen auf die reelle Achse fortgesetzt und dann numerisch gelöst.

IV

Die Gleichungen [11] und [12] können in einfacher Weise auf die reelle Achse fortgesetzt werden, wenn man folgende Spektraldarstellung benutzt:

$$\frac{i\tilde{\omega}_m}{(\tilde{\omega}_m^2+\tilde{\Delta}_m^2)^{1/2}} = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \frac{1}{i\omega_m-\omega_1} \operatorname{Im}\frac{\tilde{\omega}(\omega_1+i\eta)}{(\tilde{\Delta}^2-\tilde{\omega}^2)^{1/2}} \qquad [32]$$

$$\frac{\tilde{\Delta}_m}{(\tilde{\omega}_m^2+\tilde{\Delta}_m^2)^{1/2}} = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \frac{1}{i\omega_m-\omega_1} \operatorname{Im}\frac{\tilde{\Delta}(\omega_1+i\eta)}{(\tilde{\Delta}^2-\tilde{\omega}^2)^{1/2}} \qquad [33]$$

Dabei ist

$$(\operatorname{Re}\sqrt{\ }) > 0 \qquad [34]$$

zu nehmen. [32] und [33] erhält man aus [2] nach Integration über p und der Spektraldarstellung in der Form

$$\mathcal{G}(p, i\omega_m) = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \frac{\operatorname{Im} G(p,\omega_1)}{i\omega_m-\omega_1} \qquad [35]$$

Die Summen über ω_m lassen sich ausführen:

$$T\sum_{\omega_m}\frac{-1}{i\omega_m-\omega_1}\sum_{ij}|\langle i|\underset{\sim}{J}|j\rangle|^2\frac{n_i-n_j}{i\omega_m-i\omega_m+\delta_{ij}} =$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{ij}|\langle i|\underset{\sim}{J}|j\rangle|^2\frac{n_i-n_j}{i\omega_m-\omega_1+\delta_{ij}}\left[\tanh\frac{\beta\omega_1}{2}-\operatorname{cth}\frac{\beta\delta_{ij}}{2}\right] \qquad [36]$$

Wenn wir beachten daß

$$\operatorname{Im}\frac{\tilde{\omega}(-\omega_1+i\eta)}{(\tilde{\Delta}^2-\tilde{\omega}^2)^{1/2}} = \operatorname{Im}\frac{\tilde{\omega}(\omega_1+i\eta)}{(\tilde{\Delta}^2-\tilde{\omega}^2)^{1/2}} \qquad [37]$$

$$\operatorname{Im}\frac{\tilde{\Delta}(-\omega_1+i\eta)}{(\tilde{\Delta}^2-\tilde{\omega}^2)^{1/2}} = \operatorname{Im}\frac{\tilde{\Delta}(\omega_1+i\eta)}{(\tilde{\Delta}^2-\tilde{\omega}^2)^{1/2}} \qquad [38]$$

können wir die Integrationen in [32] und [33] auf positive ω beschränken und erhalten

$$\tilde{\omega} = \omega + \frac{1}{2\tau} \sum_{ij} |\langle i|\hat{J}|j\rangle|^2 (n_i - n_j) \cdot \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty d\omega_n \, \mathrm{Im} \, \frac{\tilde{\omega}(\omega_n + i\eta)}{(\tilde{\Delta}^2 - \tilde{\omega}^2)^{1/2}} \times$$

$$\times \left\{ \coth \frac{\beta\theta_{ij}}{2} \left[\frac{1}{\omega - \omega_n + i\eta + \theta_{ij}} + \frac{1}{\omega + \omega_n + i\eta + \theta_{ij}} \right] - \right.$$

$$\left. - \tanh \frac{\beta\omega_n}{2} \left[\frac{1}{\omega - \omega_n + i\eta + \theta_{ij}} - \frac{1}{\omega + \omega_n + i\eta + \theta_{ij}} \right] \right\} \qquad [39]$$

$$\tilde{\Delta} = \Delta - \frac{1}{2\tau} \sum_{ij} |\langle i|\hat{J}|j\rangle|^2 (n_i - n_j) \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty d\omega_n \, \mathrm{Im} \, \frac{\tilde{\Delta}(\omega_n + i\eta)}{(\tilde{\Delta}^2 - \tilde{\omega}^2)^{1/2}} \times$$

$$\times \left\{ \coth \frac{\beta\theta_{ij}}{2} \left[\frac{1}{\omega - \omega_n + i\eta + \theta_{ij}} - \frac{1}{\omega + \omega_n + i\eta + \theta_{ij}} \right] - \right.$$

$$\left. - \tanh \frac{\beta\omega_n}{2} \left[\frac{1}{\omega - \omega_n + i\eta + \theta_{ij}} + \frac{1}{\omega + \omega_n + i\eta + \theta_{ij}} \right] \right\} \qquad [40]$$

Die Wurzeln sind immer so zu wählen, daß der Realteil größer als 0 ist.

η ist eine positive infinitesimale Größe.

Um aus den 2 gekoppelten Integralgleichungen für die komplexen Funktionen $\tilde{\omega}, \tilde{\Delta}$ 2 (fast) entkoppelte zu erhalten, setzen wir

$$\tilde{\omega}(\omega) = \omega \cdot Z(\omega) \qquad [41]$$

$$\tilde{\Delta}(\omega) = \Gamma(\omega) \cdot Z(\omega) \qquad [42]$$

Beachtet man, daß

$$\mathrm{Im} \, \frac{\tilde{\Delta}}{\sqrt{\tilde{\Delta}^2 - \tilde{\omega}^2}} \, \mathrm{sign} \, \mathrm{Re} \sqrt{\tilde{\Delta}^2 - \tilde{\omega}^2} = \qquad [43]$$

$$= \mathrm{Re} \, \frac{\tilde{\Delta}}{\sqrt{\tilde{\omega}^2 - \tilde{\Delta}^2}} \, \mathrm{sign} \, \mathrm{Im} \sqrt{\tilde{\omega}^2 - \tilde{\Delta}^2}$$

und

$$\frac{\tilde{\omega}}{\sqrt{\tilde{\omega}^2 - \tilde{\Delta}^2}} \, \mathrm{sign} \, \mathrm{Im} \sqrt{\tilde{\omega}^2 - \tilde{\Delta}^2} = \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Gamma^2(\omega)}} \, \mathrm{sign} \left(\mathrm{Im} \left[Z(\omega) \cdot \sqrt{\omega^2 - \Gamma^2(\omega)} \right] \right) \qquad [44]$$

so erhalten wir

$$[1-Z(\omega)]\cdot\omega = \frac{1}{2\tau}\sum_{ij}|\langle i|\underset{\sim}{J}|j\rangle|^2(n_i-n_j)\cdot\frac{1}{2\pi}\int_0^\infty d\omega_n \,\mathrm{Re}\,\frac{\omega_n}{\sqrt{\omega_n^2-\Gamma^2(\omega_n)}}\times$$

$$\times\left\{\tanh\frac{\beta\omega_n}{2}\left[\frac{1}{\omega-\omega_n+i\eta+\delta_{ij}}-\frac{1}{\omega+\omega_n+i\eta+\delta_{ij}}\right]-\right.$$

$$\left.-\coth\frac{\beta\delta_{ij}}{2}\left[\frac{1}{\omega-\omega_n+i\eta+\delta_{ij}}+\frac{1}{\omega+\omega_n+i\eta+\delta_{ij}}\right]\right\} \qquad [45]$$

$$\Gamma(\omega)\cdot Z(\omega) = \Delta+\frac{1}{2\tau}\sum_{ij}|\langle i|\underset{\sim}{J}|j\rangle|^2(n_i-n_j)\cdot\frac{1}{2\pi}\int_0^\infty d\omega_n \,\mathrm{Re}\,\frac{\Gamma(\omega_n)}{\sqrt{\omega_n^2-\Gamma^2(\omega_n)}}\times$$

$$\times\left\{\tanh\frac{\beta\omega_n}{2}\left[\frac{1}{\omega-\omega_n+i\eta+\delta_{ij}}+\frac{1}{\omega+\omega_n+i\eta+\delta_{ij}}\right]-\right.$$

$$\left.-\coth\frac{\beta\delta_{ij}}{2}\left[\frac{1}{\omega-\omega_n+i\eta+\delta_{ij}}-\frac{1}{\omega+\omega_n+i\eta+\delta_{ij}}\right]\right\} \qquad [46]$$

Die Wurzeln müssen so gewählt werden, daß

$$\mathrm{Im}\left(Z(\omega)\cdot\sqrt{\omega^2-\Gamma^2(\omega)}\right)>0 \qquad [47]$$

Für die numerischen Rechnungen ist es zweckmäßig, zwischen elastischen und inelastischen Streuprozessen zu unterscheiden. Mit der in [15] definierten Übergangsmatrix $H_{\mu\nu}$ zwischen den Energieniveaus μ und ν lauten die Gleichungen, wenn wir die Beziehung benutzen:

$$\lim_{\eta\to 0^+}\int_a^b\frac{F(x)}{x-x_0-i\eta}\,dx = \begin{cases} \mathcal{P}\int_a^b dx\,\frac{F(x)}{x-x_0}+i\pi F(x_0) & \text{für } a\le x_0\le b \\ \int_a^b\frac{F(x)}{x-x_0} & \text{sonst} \end{cases}$$

$$[48]$$

$$\left[1-\zeta(\omega)\right]\cdot\omega = \frac{1}{2\tau}\left(\sum_\mu K_{\mu\mu}\,n_\mu\right)\cdot\frac{1}{\pi}\left\{ \fint_0^\infty d\omega_1\, \mathrm{Re}\,\frac{\omega_1}{\sqrt{\omega_1^2-\Gamma^2(\omega_1)}}\times\right.$$

$$\left.\times\left[\frac{1}{\omega_1+\omega}-\frac{1}{\omega_1-\omega}\right]-i\pi\,\mathrm{Re}\,\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2-\Gamma^2(\omega)}}\right\}+$$

$$+\frac{1}{2\tau}\sum_{\mu<\nu}K_{\mu\nu}(n_\mu+n_\nu)\cdot\frac{1}{2\pi}\left\{\fint_0^\infty d\omega_1\,\mathrm{Re}\,\frac{\omega_1}{\sqrt{\omega_1^2-\Gamma^2(\omega_1)}}\times\right.$$

$$\times\left[\left(1-\tanh\frac{\beta\omega_1}{2}\tanh\frac{\beta|\delta_{\mu\nu}|}{2}\right)\left(\frac{1}{\omega_1+\omega-|\delta_{\mu\nu}|}-\frac{1}{\omega_1-\omega-|\delta_{\mu\nu}|}\right)+\right.$$

$$\left.+\left(1+\tanh\frac{\beta\omega_1}{2}\tanh\frac{\beta|\delta_{\mu\nu}|}{2}\right)\cdot\frac{1}{\omega_1+\omega+|\delta_{\mu\nu}|}-\frac{1}{\omega_1-\omega+|\delta_{\mu\nu}|}\right]-$$

$$-i\pi\left[\left(1-\tanh\frac{\beta(\omega+|\delta_{\mu\nu}|)}{2}\cdot\tanh\frac{\beta|\delta_{\mu\nu}|}{2}\right)\mathrm{Re}\,\frac{\omega+|\delta_{\mu\nu}|}{\sqrt{(\omega+|\delta_{\mu\nu}|)^2-\Gamma^2(\omega+|\delta_{\mu\nu}|)}}+\right.$$

$$-\theta(|\delta_{\mu\nu}|-\omega)\left(1-\tanh\frac{\beta(|\delta_{\mu\nu}|-\omega)}{2}\tanh\frac{\beta|\delta_{\mu\nu}|}{2}\right)\cdot\mathrm{Re}\,\frac{|\delta_{\mu\nu}|-\omega}{\sqrt{(|\delta_{\mu\nu}|-\omega)^2-\Gamma^2(|\delta_{\mu\nu}|-\omega)}}+$$

$$\left.\theta(\omega-|\delta_{\mu\nu}|)\left(1+\tanh\frac{\beta(\omega-|\delta_{\mu\nu}|)}{2}\tanh\frac{\beta|\delta_{\mu\nu}|}{2}\right)\cdot\mathrm{Re}\,\frac{\omega-|\delta_{\mu\nu}|}{\sqrt{(\omega-|\delta_{\mu\nu}|)^2-\Gamma^2(\omega-|\delta_{\mu\nu}|)}}\right]$$

[49]

$$(\omega)\cdot\zeta(\omega) = \Delta-\frac{1}{2\tau}\left(\sum_\mu K_{\mu\mu}\,n_\mu\right)\cdot\frac{1}{\pi}\left\{\fint_0^\infty d\omega_1\,\mathrm{Re}\,\frac{\Gamma(\omega_1)}{\sqrt{\omega_1^2-\Gamma^2(\omega_1)}}\times\right.$$

$$\left.\times\left[\frac{1}{\omega_1+\omega}+\frac{1}{\omega_1-\omega}\right]-i\pi\,\mathrm{Re}\,\frac{\Gamma(\omega)}{\sqrt{\omega^2-\Gamma^2(\omega)}}\right\}-$$

$$\frac{1}{2\tau}\sum_{\mu<\nu}K_{\mu\nu}(n_\mu+n_\nu)\cdot\frac{1}{2\pi}\left\{\fint_0^\infty d\omega_1\,\mathrm{Re}\,\frac{\Gamma(\omega_1)}{\sqrt{\omega_1^2-\Gamma^2(\omega_1)}}\times\right.$$

$$\times\left[\left(1-\tanh\frac{\beta\omega_1}{2}\tanh\frac{\beta|\delta_{\mu\nu}|}{2}\cdot\left(\frac{1}{\omega_1+\omega-|\delta_{\mu\nu}|}+\frac{1}{\omega_1-\omega-|\delta_{\mu\nu}|}\right)+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\left(1+\tanh\frac{\beta\omega_1}{2}\tanh\frac{\beta|\delta_{\mu\nu}|}{2}\cdot\left(\frac{1}{\omega_1+\omega+|\delta_{\mu\nu}|}+\frac{1}{\omega_1-\omega+|\delta_{\mu\nu}|}\right)\right]-\right.$$

$$-i\pi\left[\left(1-\tanh\frac{\beta(\omega+|\delta_{\mu\nu}|)}{2}\tanh\frac{\beta|\delta_{\mu\nu}|}{2}\right)\cdot\mathrm{Re}\,\frac{\Gamma(\omega+|\delta_{\mu\nu}|)}{\sqrt{(\omega+|\delta_{\mu\nu}|)^2-\Gamma^2(\omega+|\delta_{\mu\nu}|)}}-\right.$$

$$-\Theta(|\delta_{\mu\nu}|-\omega)\left(1-\tanh\frac{\beta(|\delta_{\mu\nu}|-\omega)}{2}\tanh\frac{\beta|\delta_{\mu\nu}|}{2}\right)\cdot\mathrm{Re}\,\frac{\Gamma(|\delta_{\mu\nu}|-\omega)}{\sqrt{(|\delta_{\mu\nu}|-\omega)^2-\Gamma^2(|\delta_{\mu\nu}|-\omega)}}+$$

$$\left.+\Theta(\omega-|\delta_{\mu\nu}|)\left(1+\tanh\frac{\beta(\omega-|\delta_{\mu\nu}|)}{2}\tanh\frac{\beta|\delta_{\mu\nu}|}{2}\right)\mathrm{Re}\,\frac{\Gamma(\omega-|\delta_{\mu\nu}|)}{\sqrt{(\omega-|\delta_{\mu\nu}|)^2-\Gamma^2(\omega-|\delta_{\mu\nu}|)}}\right.$$

[50]

[49] und [50] wurden numerisch gelöst und daraus die Zustandsdichte berechnet.
Einige typische Beispiele sowohl für den Fall von 2 Singuletts als auch, daß der Grundzustand magnetisch ist, zeigen die Fig. 1, 2, 3, 4. Nach dem Maximum bei der Energie $\omega = \Delta$ ist deutlich die Struktur bei $\omega = \Delta \pm m\delta$ zu erkennen. Im Falle von 2 Singuletts, bei denen also elastische Streuung nicht vorkommt, ist das Maximum bei $\omega = \Delta$ sehr scharf.
Im magnetischen Fall (Fig. 4) kommen die elastischen Streuprozesse hinzu und führen zu einer größeren Breite und geringeren Höhe des Maximums bei $\omega = \Delta$
Den Grenzfall verschwindender Aufspaltung haben Skalski et al. (10) behandelt und finden zu Fig. 4 analoge Resultate, wenn man von der Struktur absieht, die die Aufspaltung verursacht.
Wir wollen jetzt die Gleichungen [49] und [50] diskutieren, um zu verstehen, warum die Struktur der numerischen Resultate der Fig. 1 - 4 zustandekommt. Der Einfachheit halber nehmen wir den Fall von 2 Singuletts an, bei denen die elastischen Streuprozesse nicht vorkommen, d.h. die $\sum_{\mu} \gamma_{\mu\mu} = 0$
Wenn wir vom reinen BCS-Fall ausgehen, bei dem

$$Z(\omega) = 1 \quad , \quad \Gamma(\omega) = \Delta \qquad [51]$$

oder

$$\tilde{\omega} = \omega \, , \quad \tilde{\Delta} = \Delta \qquad [52]$$

so haben wir inder Zustandsdichte

$$N(\omega) = N(0) \cdot \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}} \qquad [53]$$

die bekannte Wurzelsingularität.
Wenn wir die Verunreinigungen einführen und die Konzentration erhöhen, wird die Struktur in $(\omega^2 - \Gamma^2(\omega))^{-1/2}$ zwar keine Singularität mehr aufweisen, es wird aber noch ein Starkes Maximum bei $\omega = \Delta$ haben. Dann wird aber auch

$$\frac{\Gamma(\omega)}{\sqrt{\omega^2 - \Gamma^2(\omega)}}$$

an derselben Stelle sich stark ändern und damit über [50] auch $\Gamma(\omega)$
Dann können wir aber weiter schließen, daß auf Grund des Nenners

$$\text{z. B.} \quad \frac{1}{\omega_1 - \omega + i\delta}$$

unter dem Integral gerade dann ein großer Beitrag vom Integral für $\Gamma(\omega)$ kommen wird, wenn

$$\omega = \Delta + \delta \qquad [54]$$

weil dann der Nenner genau dann verschwindet, wenn der Vorfaktor

$$\mathrm{Re} \; \frac{\Gamma(\omega)}{\sqrt{\omega_1^2 - \Gamma^2(\omega_1)}}$$

stark veränderlich ist und daher der Wert des Integrals i.a. groß ist.
Eine analoge Überlegung kann man für

$$\omega = \Delta - \delta \qquad [55]$$

anstellen.

Wenn aber, aus diesen Überlegungen resultierend, $\Gamma(\omega)$ bei $\Delta + \delta$ starke Struktur aufweist und damit auch

$$\mathrm{Re}\ \frac{\Gamma(\omega)}{\sqrt{\omega^2 - \Gamma^2(\omega)}}$$

sowie die Zustandsdichte

$$\mathrm{Re}\ \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Gamma^2(\omega)}}$$

so folgt mit genau denselben Überlegungen wie oben, daß auch bei

$$\omega = \Delta + 2\delta \qquad [56]$$

große Beiträge für $\Gamma(\omega)$ vom Integral kommen. werden. Zusammengefaßt läßt sich sagen, daß die Aufspaltung bei

$$\omega = \Delta + n\delta$$

als Struktur in der Zustandsdichte gesehen werden kann. Um den Spezialfall von Abrikosov verschwindender Aufspaltung aus unseren Gleichungen zu erhalten, gehen wir vom BCS-Fall aus und erhöhen die Konzentration. Anfangs ist $\Gamma(\omega)$ reell bis zu Δ. Das folgt, weil für kleine ω und $\delta \to 0$ die Integrale einen verschwindenden Beitrag zu $\mathrm{Re}\,\Gamma(\omega)$ zusätzlich zu Δ liefern und somit der BCS_Zustand kaum geändert wird. mit Erhöhung der Konzentration wächst der Beitrag der Integrale, Γ wird also kleiner als Δ damit wird auch $\mathrm{Im}\,\Gamma(\omega)$, def

$$\mathrm{Im}\,\Gamma(\omega) \sim \mathrm{Re}\,\frac{\Gamma(\omega)}{\sqrt{\omega^2 - \Gamma^2(\omega)}} \qquad [57]$$

schon bei kleineren ω von o aus starten, und damit auch die Zustandsdichte.

Fig. 5 und 6 zeigen den Ordnungsparameter als Funktion der Temperatur. Als Vergleich ist die entsprechende Kurve von Skalski (1o) gestrichelt eingezeichnet. Der Schnittpunkt mit der x-Achse Verschiebt sich im Falle von 2 Singuletts mit steigender Aufspaltung zu höheren T. $\Delta = 0$ ist aber der Phasenübergangspunkt zum Normalleiter und wurde in (6) untersucht.
In Fig. 7, 8, 9, 1o, 11, 12 ist Δ als Funktion der Verunreinigungskonzentration für verschiedene Temperaturen und Aufspaltungsenergien aufgetragen. Wieder zeigt sich, daß im Fall von 2 Singuletts die Supraleitung erst bei einer höheren Temperatur zerstört wird, wenn die Aufspaltung hoch ist. Dasselbe Verhalten wurde auch in (6) gefunden.
Für $T \to o$ können wir die Integrale in [49] und [5o] ausführen (wir betrachten der Einfachheit halber den Fall von 2 Singuletts) und erhalten

$$\tilde{\omega}(\omega) = \omega + \frac{i}{2\tau} K_{\mu\nu} \cdot \frac{\tilde{\omega}(\omega-\delta)}{\sqrt{\tilde{\omega}^2(\omega-\delta) - \tilde{\Delta}^2(\omega-\delta)}} \qquad [58]$$

$$\tilde{\Delta}(\omega) = \Delta - \frac{i}{2\tau} K_{\mu\nu} \cdot \frac{\tilde{\Delta}(\omega-\delta)}{\sqrt{\tilde{\omega}^2(\omega-\delta) - \tilde{\Delta}^2(\omega-\delta)}} \qquad [59]$$

Setzen wir

$$u(\omega) \equiv \frac{\tilde{\omega}(\omega)}{\tilde{\Delta}(\omega)} \qquad [60]$$

dann folgt

$$\frac{W}{\Delta} = u(\omega) - \frac{i}{2\tau} \frac{K_{\mu\nu}}{\Delta} \cdot \frac{u(\omega) + u(\omega-\delta)}{\sqrt{u^2(\omega-\delta) - 1}} \qquad [61]$$

Für $\delta \to 0$ [62]

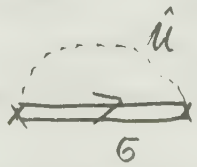
erhalten wir den Fall von Skalski (1o) für T = o
d.h.

$$\Delta = \Delta\,(T=o) \qquad [63]$$

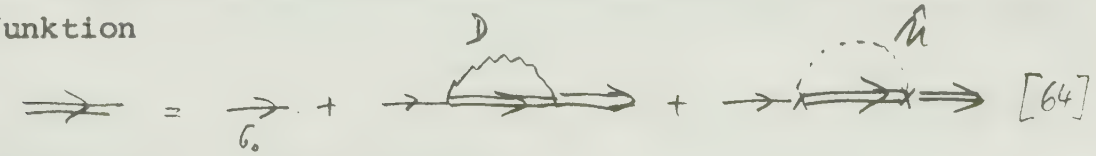
V

In diesem Abschnitt wollen wir die Änderung der Übergangstemperatur eines stark koppelnden Supraleiters studieren, wenn Verunreinigungen zugesetzt werden. Um den Einfluß der Verunreinigungen auf den Supraleiter zu untersuchen, verwenden wir den Nambuformalismus wie im 1. Teil dieser Arbeit. Wir berücksichtigen explizit die el-ph Wechselwirkung, die zur Supraleitung führt und nehmen als freie Greenfunktion die des normalen Metalls.
Der Vollständigkeit halber berücksichtigen wir neben der Austauschwechselwirkung auch die normale Wechselwirkung.
Als Selbstenergie von den Phononen nehmen wir

Migdal (39) zeigte, daß alle weiteren Korrekturen von der Größenordnung $(m/M)^{1/2}$ kleiner sind, mit m als Elektronenmasse und M der Ionenmasse.
Für die Selbstenergie von den Verunreinigungen nehmen wir



Damit erhalten wir folgende Gleichung für die Greenfunktion



[64]

mit der freien Greenfunktion

$$G_0 = \left(\varepsilon_p \beta_3 \times G_0 - i\omega_m \beta_0 \times G_0 \right)^{-1} \qquad [65]$$

$$\hat{U} = U_1(p-p')\,\tau_3\,\chi\sigma_0 + U_2(p-p')\,\underset{\sim}{S}\cdot\underset{\sim}{\alpha} \qquad [66]$$

$$\underset{\sim}{\alpha} = \frac{1+\rho_3}{2}\,\underset{\sim}{\sigma} + \frac{1-\rho_3}{2}\,\sigma_2\,\underset{\sim}{\sigma}\,\sigma_2 \qquad [67]$$

Das Wechselwirkungspotential $\hat{U}$ zwischen Leitungselektronen und Verunreinigungen besteht aus dem gewöhnlichen Verunreinigungspotential U_1 und der Austauschwechselwirkung U_2. $\underset{\sim}{S}$ ist der Spinoperator des lokalisierten magnetischen MOments. $\underset{\sim}{\sigma}$ und $\underset{\sim}{\rho}$ sind die Vektoren der Pauli'schen Spin- und Isospinmatrizen. $\tilde{U}$ in [64] setzt sich aus der Phonen- und Coulombwechselwirkung zusammen, auf die wir später eingehen werden.

Der Beitrag der Verunreinigungen zur elektronischen Selbstenergie ist aus [64]

$$\Sigma(p,\omega_m) = n\int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\left[\hat{U}(p-p')\,G(\omega_m,p')\,\hat{U}(p-p')\right] \qquad [68]$$

n ist die Zahl der Verunreinigungen.

Für den Phononenbeitrag haben wir

[69]

Durch die gestrichelte Linie des 1. Graphen stellen wir die abgeschirmte Coulombwechselwirkung dar. Die Wellenlinie des 2. Graphen ist der Phononenpropagator

$$D_\lambda(q,i\nu_m) = \int_0^\infty d\nu\, B_\lambda(q,\nu)\left[\frac{1}{i\nu_m-\nu} - \frac{1}{i\nu_m+\nu}\right] \qquad [70]$$

$\nu_m = 2\pi T m$, m ganz

mit der Spektralfunktion

$$B_\lambda(q,\nu) = \left(1-e^{\beta\nu}\sum_{ij} e^{-\beta E_i}\,|\langle j|\varphi_{q\lambda}|i\rangle|^2\,\delta(\nu-E_j+E_i)\right)\Big/\sum_i e^{-\beta E_i} \qquad [71]$$

mit

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad , \quad \beta = \frac{1}{kT} \qquad [72]$$

Die Vertices im 2. term von [69] sind die abgeschirmten Elektron-Phonon-Kopplungsfunktionen

$$g_{q\lambda}(i\nu_m) = \frac{g_{p,p-q,\lambda}}{K(q, i\nu_m)} \qquad [73]$$

mit der Dielektizitätsfunktion $K(q, i\nu_m)$
Da D wie $\frac{1}{\nu_m^2}$ gegen o geht für $|\nu_m| \neq 0$ und die dynamische Abschirmung erst für $\nu_m \sim E_F \gg \omega$ bedeutend wird, ersetzen wir $g_{pp'\lambda}$ durch seinen statischen Grenzwert $g_{pp\lambda}(0)$ und betrachten ihn als Parameter, der durch das Experiment bestimmt wird. Über eine Abschätzung der hierbei gemachten Näherungen, siehe z.B.(13). Damit erhalten wir von [69]

$$\Sigma_{ph} = -\frac{1}{\beta}\sum_{m',\lambda}\int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\, g_3 \times G_0 \;\; G_\omega(p')\, g_3 \times G_0 \, |g_{pp'\lambda}|^2 \, D_\lambda(p-p', i\omega_m - i\omega_{m'}) \qquad [74]$$

mit $\omega_m = 2\pi T(m+\frac{1}{2})$

$$\Sigma_{coul} = -\frac{1}{\beta}\sum_{m'}\int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\, g_3 \times G_0 \; G_\omega(p')\, g_3 \times G_0 \; V(p-p') \qquad [75]$$

Für die Greenfunktion machen wir den Ansatz

$$G_\omega(p) = \left[i\tilde{\omega}_m(p)\, g_0 \times G_0 - \varepsilon_p\, g_3 \times G_0 - \tilde{\Delta}_m(p)\, g_1 \times G_2 \right]^{-1} =$$

$$= -\frac{i\tilde{\omega}_m(p) g_0 \times G_0 + \varepsilon_p\, g_3 \times G_0 + \tilde{\Delta}_m(p)\, g_1 \times G_2}{\varepsilon_p^2 + \tilde{\omega}_m^2(p) + \tilde{\Delta}_m(p)} \qquad [76]$$

Für $\tilde{\omega}_m(p)$ und $\tilde{\Delta}_m(p)$ machen wir die Impulsapproximation

$\tilde{\omega}_m(p) = \tilde{\omega}_m(p_F) \equiv \tilde{\omega}_m$ und $\tilde{\Delta}_m(p) = \tilde{\Delta}_m(p_F) \equiv \tilde{\Delta}_m$

da beide Größen sich nur langsam mit p ändern. (Die Änderung erfolgt auf einer Skala der Ordnung p_F)
Die Größen $\tilde{\omega}_n$ und $\tilde{\Delta}_n$ bestimmen wir aus der Dyson-Gleichung:

$$[G(p,i\omega_n)]^{-1} = [G_0(p,i\omega_n)]^{-1} - \Sigma \qquad [77]$$

Σ ist die Summe der Selbstenergien [75], [74] und [68].
Wenn wir in [68] die p'-Integration ausführen, erhalten wir

$$\Sigma_1 = -\frac{1}{2\tau_1}\frac{i\tilde{\omega}_n \hat{g}_0 \times \hat{G}_0 - \tilde{\Delta}_n \hat{g}_1 \times \hat{G}_2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}_n^2}} - \frac{1}{2\tau_2}\frac{i\tilde{\omega}_n \hat{g}_0 \times \hat{G}_0 - \tilde{\Delta}_n \hat{g}_1 \times \hat{G}_2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}_n^2}} \qquad [78]$$

mit

$$\frac{1}{\tau_1} = n\,N(0)\int |M_1(p-p')|^2 d\Omega$$
$$\frac{1}{\tau_2} = n\,N(0)\,S\cdot(S+1)\int |M_2(p-p')|^2 d\Omega \qquad [79]$$

N(o) ist die Zustandsdichte an der Fermikante.
Um die p'-Integration in [74] und [75] durchzuführen, bemerken wir, daß p' nur im Impulsübertrag $\underset{\sim}{q} = \underset{\sim}{p} - \underset{\sim}{p}'$ auftritt und transformieren daher auf ein Integral über $\varepsilon_{p'}$, $q = |p - p'|$ und den Azimutalwinkel φ

$$\int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \cong \frac{m}{(2\pi)^3 p_F}\int d\varepsilon_{p'}\, q\, dq\, d\varphi \qquad [80]$$

mit

$$m\, d\varepsilon_{p'} = p'\, dp', \quad |p'|\sin\vartheta\, d\vartheta \cong q\,(dq/p_F) \qquad [81]$$

Die Hauptbeiträge vom $\varepsilon_{p'}$-Integral kommen von $|\varepsilon_{p'}| \lesssim \omega_D$ und wir erstrecken daher die Integrationsgrenzen bis ∞
Es wird dann

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_{p'}\, \hat{g}_3 \times \hat{G}_0\, G(p', i\omega_n)\, \hat{g}_3 \times \hat{G}_0 = \frac{-\pi\,(i\tilde{\omega}_n \hat{g}_0 \times \hat{G}_0 - \tilde{\Delta}_n \hat{g}_1 \times \hat{G}_2)}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}_n^2}} \qquad [82]$$

Die anisotrope Phononenzustandsichte, die el-ph-Wechselwirkung und Fermifläche führen zu einer anisotropen Selbstenergie. Diese Anisotropieeffekte werden durch die Streuung an den Vefunreinigungen verschmiert. Markowitz und Kadanoff (4o) zeigten, daß man die gemittelte Selbstenergie

$$\overline{\Sigma(p,\omega)} = \int \frac{d\Omega_p}{4\pi}\,\Sigma(p,\omega) \qquad [83]$$

erhält, wenn man die effektive Wechselwirkung durch den Mittelwert ersetzt. Dann folgt für [74]

$$\Sigma_{ph} = \frac{\pi m}{(2\pi)^2 \beta p_F} \sum_{m'\lambda} \frac{i\omega_m \rho_0 \times \sigma_0 - \tilde{\Delta}_m \rho_1 \times \sigma_2}{\sqrt{\tilde{\omega}_m^2 + \tilde{\Delta}_m^2}} \times \qquad [84]$$

$$\times \int \frac{d\Omega_q}{4\pi} \int_0^{2p_F} q\,dq \int_0^{\infty} d\nu\, B_\lambda(q,\nu)\, |\overline{g_{q\lambda}}|^2 \left[\frac{1}{i\omega_m - i\omega_{m'} - \nu} - \frac{1}{i\omega_m - i\omega_{m'} + \nu} \right]$$

Da der größte Impulsübertrag erfolgt, wenn ein Elektron von p_F nach $-p_F$ gestreut wird, ist die q-Integration beschränkt auf $2p_F$

Führen wir den Integralkern ein:

$$K(i\omega_m, i\omega_{m'}) = N(0) \int_0^{2p_F} \frac{q\,dq}{2p_F^2} \int \frac{d\Omega_q}{4\pi} \int_0^{\infty} d\nu \sum_\lambda |g_{q\lambda}|^2 B_\lambda(q,\nu) \times$$

$$\times \left[\frac{1}{i\omega_m - i\omega_{m'} - \nu} - \frac{1}{i\omega_m - i\omega_{m'} + \nu} \right] =$$

$$= \sum_\lambda \int_0^{\infty} d\nu\, \alpha_\lambda^2(\nu) F_\lambda(\nu) \left[\frac{1}{i\omega_m - i\omega_{m'} - \nu} - \frac{1}{i\omega_m - i\omega_{m'} + \nu} \right] \qquad [85]$$

mit

$$\alpha_\lambda^2(\nu) F_\lambda(\nu) = \frac{N(0)}{8\pi p_F^2} \int d\Omega_q \int_0^{2p_F} q\,dq\, |\overline{g_{q\lambda}}|^2 B_\lambda(q,\nu) \qquad [86]$$

und der Zustandsdichte $N(0) = \frac{m p_F}{2\pi^2}$

so erhalten wir für [84]

$$\Sigma_{ph} = \frac{\pi}{\beta} \sum_{m'} \frac{i\tilde{\omega}_{m'} \rho_0 \times \sigma_0 - \tilde{\Delta}_{m'} \rho_1 \times \sigma_2}{\sqrt{\tilde{\omega}_{m'}^2 + \tilde{\Delta}_{m'}^2}} \cdot K(i\omega_m, i\omega_{m'}) \qquad [87]$$

Um [75] zu behandeln, führen wir ein impulsunabhängiges Pseudopotential U_c (8) ein, sodaß wir die m'-Summation bei ω_D abschneiden können. Wenn wir dann die p'-Integration durchführen und beachten, daß die renormalisierte Frequenz $\tilde{\omega}_m$ antisymmetrisch in n ist, erhalten wir für [75]

$$\Sigma_{coul} = -\frac{\pi}{\beta} N(0) \sum_{m'=-m_0}^{m_0} \frac{\tilde{\Delta}_{m'} \, g_1 \times G_2}{\sqrt{\tilde{\omega}_{m'}^2 + \tilde{\Delta}_{m'}^2}} \cdot \mu_c \qquad [88]$$

Vergleichen wir [77] mit [76] unter Benutzung von [78], [87] und [88], so erhalten wir 2 Sätze von Bestimmungsgleichungen für $\tilde{\omega}_m$ und $\tilde{\Delta}_m$:

$$\tilde{\omega}_m = \omega_m + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2}\right) \frac{\tilde{\omega}_m}{\sqrt{\tilde{\omega}_m^2 + \tilde{\Delta}_m^2}} -$$

$$- \frac{\pi}{\beta} \sum_{m'}^{\omega_D} \frac{\tilde{\omega}_{m'}}{\sqrt{\tilde{\omega}_{m'}^2 + \tilde{\Delta}_{m'}^2}} \, K(i\omega_m, i\omega_{m'}) \qquad [89]$$

$$\tilde{\Delta}_m = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_2}\right) \frac{\tilde{\Delta}_m}{\sqrt{\tilde{\omega}_m^2 + \tilde{\Delta}_m^2}} -$$

$$- \frac{\pi}{\beta}\left(\sum_{m'}^{\omega_D} \frac{\tilde{\Delta}_{m'}}{\sqrt{\tilde{\omega}_{m'}^2 + \tilde{\Delta}_{m'}^2}} \, K(i\omega_m, i\omega_{m'}) + N(0) \mu_c \sum_{m'=-m_0}^{m_0} \frac{\tilde{\Delta}_{m'}}{\sqrt{\tilde{\omega}_{m'}^2 + \tilde{\Delta}_{m'}^2}} \right) \cdot$$

$$[90]$$

Spezialisierung auf T_c

Wir beschränken uns in dieser Arbeit auf die Bestimmung der Übergangstemperatur T_c. Bei T_c müssen die anomalen Greenfunktionen verschwinden, da keine Cooperpaare im Normalzustand vorhanden sind. Daher linearisieren wir die Gleichungen [89], [90]

$$\tilde{\omega}_n = \omega_n + \frac{1}{2\lambda_1} \operatorname{sign}(\omega_n) - \frac{\pi}{\beta} \sum_{n'} \operatorname{sign}(\omega_{n'}) K(i\omega_n, i\omega_{n'}) \quad [91]$$

$$\tilde{\Delta}_n = \Delta_n + \frac{1}{2\lambda_2} \frac{\tilde{\Delta}_n}{|\tilde{\omega}_n|} \quad [92]$$

mit

$$\frac{1}{\lambda_1} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2}, \qquad \frac{1}{\lambda_2} = \frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_2} \quad [93]$$

$$\Delta_n = -\frac{\pi}{\beta} \sum_{n'} \frac{\tilde{\Delta}_{n'}}{|\tilde{\omega}_{n'}|} \left(K(i\omega_n, i\omega_{n'}) + \mu_c \right) \quad [94]$$

Setzen wir

$$y_n = \omega_n - \frac{\pi}{\beta} \sum_{n'} \operatorname{sign}(\omega_{n'}) K(i\omega_n, i\omega_{n'}) \quad [95]$$

$$\eta_1 = 1 + \frac{\operatorname{sign}(\omega_n)}{2\lambda_1 |y_n|} \quad [96]$$

$$\eta_s = 1 + \frac{1}{\tau_s |y_n|} \quad [97]$$

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{1}{2\lambda_1} - \frac{1}{2\lambda_2} = \frac{1}{\tau_2} \quad [98]$$

so erhalten wir aus [92]

$$\tilde{\Delta}_n = \frac{\eta_1}{\eta_s} \Delta_n \quad [99]$$

und aus [94]

$$\Delta_n = -\frac{\pi}{\beta} \sum_{n'} \frac{\Delta_{n'}}{\eta_s |y_{n'}|} \left(K(i\omega_n, i\omega_{n'}) + \mu_c \right) \quad [100]$$

Ziehen wir von [100] den Term, der η_s nicht enthält, ab:

$$\Delta_n = -\frac{\pi}{\beta}\sum_{n'}\left[\left(\frac{\Delta_{n'}}{\eta_s|\gamma_{n'}|}-\frac{\Delta_{n'}}{|\gamma_{n'}|}\right)\cdot\left(K(i\omega_n,i\omega_{n'})+\mu_c\right)\right]-$$

$$-\frac{\pi}{\beta}\sum_{n'}\frac{\Delta_{n'}}{|\gamma_{n'}|}\left(K(i\omega_n,i\omega_{n'})+\mu_c\right) \qquad [101]$$

und setzen

$$\gamma_n \equiv \omega_n \cdot Z(\omega_n)\,,\quad \Delta'_n \equiv \frac{\Delta_n}{Z(\omega_n)} \qquad [102]$$

so erhalten wir die Gleichung

$$\Delta'_n = \frac{\pi}{\beta}\frac{1}{Z(\omega_n)}\frac{1}{i\eta_s}\sum_{n'}\frac{\Delta'_{n'}}{|\omega_{n'}|\left(|\gamma_{n'}|+\frac{1}{i\eta_s}\right)}\cdot\left(K(i\omega_n,i\omega_{n'})+\mu_c\right)-$$

$$-\frac{\pi}{\beta}\frac{1}{Z(\omega_n)}\sum_{n'}\frac{\Delta'_{n'}}{|\omega_{n'}|}\left(K(i\omega_n,i\omega_{n'})+\mu_c\right) \qquad [103]$$

In der Umgebung von T_c können wir folgende Näherung einführen (41)

$$\Delta'_n = \Delta_0 \quad \text{für} \quad |\omega_n| < \omega_0\,,\quad \omega_0 \text{ größte Phononenenergie}$$
$$\Delta'_n = \Delta_\infty \quad\quad |\omega_n| > \omega_0 \qquad [104]$$

Wir berechnen zuerst $Z(\omega_0)$ und $Z(\omega_\infty)$

Aus [95] und [102] erhalten wir für $Z(\omega_\infty)$

$$Z(\omega_\infty) = \lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{1}{\omega_n}\cdot\frac{\pi}{\beta}\int d\nu\,\alpha^2(\nu)F(\nu)\left[\sum_{m=0}^{n}\frac{4\nu}{\nu^2+4\pi^2T^2m^2}-\frac{2}{\nu}\right]\right) \qquad [105]$$

Wenn wir berücksichtigen daß

$$\frac{\pi}{\beta}\int d\nu\,\alpha^2(\nu)F(\nu)\left[\sum_{m=0}^{\infty}\frac{4\nu}{\nu^2+4\pi^2T^2m^2}-\frac{2}{\nu}\right] =$$

$$= \pi\int d\nu\,\alpha^2(\nu)\,F(\nu)\left[\operatorname{cth}\frac{\nu}{2T}-\frac{2T-2}{\nu}\right] \qquad [106]$$

so folgt

$$Z(\omega_\infty) = 1$$

Ebenso aus [95] und [102]

$$Z(\omega_0) = 1+\int d\nu\,\alpha^2(\nu)\,F(\nu)\,\frac{2}{\nu}\,d\nu = 1+\lambda \qquad [107]$$

mit

$$\lambda = 2\int\alpha^2(\nu)\,F(\nu)\,\frac{d\nu}{\nu} \qquad [108]$$

Wir wollen jetzt die einzelnen Beiträge zu [103] behandeln.

a) $$\Delta_0' = \frac{\pi}{\beta}\frac{1}{z(\omega_0)}\cdot\frac{1}{\tau_s}\Delta_0'\sum_{n'=-n_0}^{n_0}\frac{1}{|\omega_{n'}|\cdot(|\gamma_{n'}|+\frac{1}{\tau_s})}\cdot\int dv\,\alpha^2(v)F(v)\frac{-2v}{v^2+4\pi^2T^2n'^2} =$$

$$= -\frac{\pi}{\beta}\frac{2\Delta_0'}{\tau_s z(\omega_0)}\int dv\,2v\,\alpha^2(v)F(v)\sum_{n'=0}^{n_0}\frac{1}{v^2+4\pi^2T^2n'^2}\cdot\frac{1}{\omega_{n'}\cdot(\gamma_{n'}+\frac{1}{\tau_s})} \qquad [109]$$

Da der Hauptbeitrag zur Summe in [109] von kleinen n' kommt, vernachlässigen wir n'^2 gegenüber v^2 und erstrecken die Summe bis ∞ . Da sich γ_n mit wachsendem n immer mehr ω_n nähert, und Abweichungen davon durch die Summation ausgeschmiert werden, setzen wir näherungsweise:

$$\gamma_n = \omega_n \cdot z(\omega_0) \qquad [110]$$

Dann erhalten wir für [109]

$$\Delta_0' = -\Delta_0'\frac{\lambda}{z^2(\omega_0)}\cdot\frac{2}{\pi T\tau_s}\sum_{n'}^{\infty}\frac{1}{(2n+n)\left(2n+n+\frac{1}{\pi T\tau_s z(\omega_0)}\right)} \qquad [111]$$

Die Summation kann ausgeführt werden

$$\Delta_0' = -\Delta_0'\frac{\lambda}{z^2(\omega_0)}\left[\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\rho}{2}\right)-\psi\left(\frac{1}{2}\right)\right] \qquad [112]$$

mit

$$\rho = \frac{1}{\pi T\tau_s z(\omega_0)}\,, \quad \psi(x) = \text{Digammafunktion}$$

b) Den 2. Beitrag erhalten wir, wenn wir die Summation von n_0 ab bis ∞ erstrecken:

$$\Delta_0' = -\frac{\pi}{\beta}\frac{2\Delta_\infty'}{\tau_s z(\omega_0)}\cdot\int dv\,\alpha^2(v)\cdot F(v)\cdot * \times\sum_{n'=n_0}^{\infty}\frac{1}{\omega_{n'}(\gamma_{n'}+\frac{1}{\tau_s})}\cdot\frac{1}{v^2+4\pi^2T^2n'^2} \qquad [113]$$

Vernachlässigen wir v^2 gegenüber n'^2 und berücksichtigen, daß die Glieder wie $1/n'^3$ gehen, so können wir den Beitrag von [113] gegenüber [111] vernachlässigen.

c) Vom Coulombterm in [103] erhalten wir 2 Beiträge. Den 2. vernachlässigen wir gegenüber dem 1. wie unter [113]. Es verbleibt

$$\Delta_0' = \frac{\pi}{\beta} \frac{M_c}{Z(\omega_0)\tau_s} 2\Delta_0' \sum_{n=0}^{n_0} \frac{1}{\omega_{n'}(\gamma_{n'} + \frac{1}{\tau_s})} =$$

$$= \Delta_0' \frac{M_c}{Z^2(\omega_0)} \left[\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\beta}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \right] \qquad [114]$$

wenn wir [110] verwenden.

d) Für große n bekommen wir nur Beiträge vom Coulombterm:

$$\Delta_\infty' = \frac{\pi}{\beta} \frac{M_c}{Z(\omega_0)\tau_s} \left(2\Delta_0' \sum_{n'=0}^{n_0} \frac{1}{\omega_{n'}(\gamma_{n'} + \frac{1}{\tau_s})} + 2\Delta_\infty' \sum_{n_0}^{n_c} \frac{1}{\omega_{n'}(\gamma_{n'} + \frac{1}{\tau_s})} \right) \qquad [115]$$

Berücksichtigen wir nur die 1. Summe in der Klammer und erstrecken die Summation bis ∞:

$$\Delta_\infty' = \Delta_0' \frac{M_c}{Z(\omega_0)} \left[\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\beta}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \right] \qquad [116]$$

Wir gehen jetzt auf die Beiträge ein die von

$$-\frac{\pi}{\beta} \frac{1}{Z(\omega_n)} \sum_{n'} \frac{\Delta_{n'}'}{|\omega_{n'}|} \left(K(i\omega_n, i\omega_{n'}) + M_c \right)$$

kommen.

e)

$$\Delta_0' = \frac{\pi}{3} 2 \cdot \frac{\Delta_0'}{Z(\omega_0)} \sum_{n'=0}^{n_0} \frac{1}{\omega_{n'}} \int dv\, \alpha^2(v) F(v) \frac{2V}{V^2 + 4\pi^2 T^2 n'^2} \qquad [117]$$

Berücksichtigen wir, daß der Hauptbeitrag von kleinen n' kommt, vernachlässigen also n'^2 gegen V^2 und setzen

$$n_0 = \frac{\omega_0}{2\pi T} \qquad [118]$$

so folgt

$$\Delta_0' = \frac{\pi}{\beta}\frac{1}{Z(\omega_0)}\, 2\lambda\Delta_0' \sum_{m'=0}^{\omega/2\pi T} \frac{1}{\pi T + 2\pi T m'} =$$

$$= \frac{\pi}{\beta}\frac{1}{Z(\omega_0)}\, 2\lambda\Delta_0' \frac{1}{2\pi T}\left[\psi\left(\frac{\omega_0}{2\pi T}+\frac{3}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right)\right] \quad [119]$$

Wenn wir die ψ-Funkion für große Argumente durch den Logarithmus ausdrücken und 3/2 im Argument der ψ-Funktion vernachlässigen, erhalten wir

$$\Delta_0' = \Delta_0' \frac{\lambda}{Z(\omega_0)} \ln\left(\frac{\omega_0}{T}\right) \quad [120]$$

f) $$\Delta_0' = \frac{\pi}{\beta}\frac{\Delta_\infty'}{Z(\omega_0)}\, 2\sum_{m'\geq m_0}^{\infty} \int d\nu \alpha^2(\nu) F(\nu) \frac{2\nu}{\nu^2 + 4\pi^2 T^2 m'^2} \cdot \frac{1}{\omega_{m'}}$$

$$= \frac{\Delta_\infty'}{Z(\omega_0)} \cdot \alpha \quad [121]$$

mit

$$\alpha = 2\frac{\pi}{\beta}\sum_{m'\geq m_0}^{\infty} \int d\nu \alpha^2(\nu) F(\nu) \frac{2\nu}{\nu^2 + 4\pi^2 T^2 m'^2} \cdot \frac{1}{\omega_{m'}} \quad [122]$$

g) Vom Coulombterm gibt es wieder 2 Beiträge zu Δ_0'

$$\Delta_0' = -\frac{\pi}{\beta}\frac{\mu_c}{Z(\omega_0)}\, 2\Delta_0' \sum_{m'=0}^{m_0} \frac{1}{\omega_{m'}} \cong$$

$$\cong -\Delta_0' \frac{\mu_c}{Z(\omega_0)} \ln\left(\frac{\omega_0}{T}\right) \quad [123]$$

mit denselben Überlegungen wie zu [120].

h) $$\Delta_0' = -\frac{\pi}{\beta}\frac{\mu_c}{Z(\omega_0)}\, 2\Delta_\infty' \sum_{m'\geq m_0}^{m_c} \frac{1}{\omega_{m'}} = \quad [124]$$

$$= -\Delta_\infty' \frac{\mu_c}{Z(\omega_0)} \ln\left(\frac{\omega_c}{\omega_0}\right) \quad [125]$$

mit $m_c = \omega_c/2\pi T$

i) Für große n erhalten wir nur Beiträge vom Coulombterm

$$\Delta_\infty' = -\frac{\mu_c}{Z(\omega_\infty)}\left[\Delta_0' \ln\left(\frac{\omega_0}{T}\right) + \Delta_\infty' \ln\left(\frac{\omega_c}{\omega_0}\right)\right] \quad [126]$$

Insgesamt haben wir also folgende 2 Gleichungen

$$\Delta_0' = -\Delta_0' \frac{\lambda}{z(\omega_0)} \left[\psi\left(\tfrac{1}{2}+\tfrac{\beta}{2}\right) - \psi\left(\tfrac{1}{2}\right)\right] +$$

$$+\Delta_0' \frac{\mu_c}{z(\omega_0)} \left[\psi\left(\tfrac{1}{2}+\tfrac{\beta}{2}\right) - \psi\left(\tfrac{1}{2}\right)\right] +$$

$$+\Delta_0' \frac{\lambda}{z(\omega_0)} \ln\left(\frac{\omega_0}{T}\right) + \Delta_\infty' \frac{\alpha}{z(\omega_0)} -$$

$$-\Delta_0' \frac{\mu_c}{z(\omega_0)} \ln\left(\frac{\omega_0}{T}\right) - \Delta_\infty' \frac{\mu_c}{z(\omega_0)} \ln\left(\frac{\omega_c}{\omega_0}\right) \quad [127]$$

$$\Delta_\infty' = \Delta_0' \mu_c \left[\psi\left(\tfrac{1}{2}+\tfrac{\beta}{2}\right) - \psi\left(\tfrac{1}{2}\right)\right] - \Delta_0' \frac{\mu_c}{z(\omega_\infty)} \ln\left(\frac{\omega_0}{T}\right) -$$

$$-\Delta_\infty' \frac{\mu_c}{z(\omega_\infty)} \ln\left(\frac{\omega_c}{\omega_0}\right) \quad [128]$$

In [128] können wir Δ_∞' durch Δ_0' ausdrücken:

$$\Delta_\infty' = -\Delta_0' \frac{-\mu_c\left[\psi\left(\tfrac{1}{2}+\tfrac{\beta}{2}\right) - \psi\left(\tfrac{1}{2}\right)\right] + \mu_c \ln\left(\frac{\omega_0}{T}\right)}{1+\mu_c \ln\left(\frac{\omega_c}{\omega_0}\right)} \quad [129]$$

Führen wir noch die Abkürzung

$$\mu^* = \frac{\mu_c}{1+\mu_c \ln(\omega_c/\omega_0)} \quad [130]$$

ein, so erhalten wir für [129]

$$\Delta_\infty' = -\mu^* \Delta_0' \left(\ln\left(\frac{\omega_0}{T}\right) - \left[\psi\left(\tfrac{1}{2}+\tfrac{\beta}{2}\right) - \psi\left(\tfrac{1}{2}\right)\right]\right) \quad [131]$$

[131] in [127] eingesetzt ergibt

$$1 = \frac{\lambda - \mu^* - \mu^* \alpha}{Z(\omega_0)} \cdot \left[\psi\left(\frac{1}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\rho}{2}\right) + \ln\left(\frac{\omega_0}{T}\right) \right] \quad [132]$$

Schreiben wir [132] in der Form:

$$\frac{Z(\omega_0)}{\lambda - \mu^* - \mu^* \alpha} = -\left[\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\rho}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \right] + \ln \frac{\omega_0}{T} \quad [133]$$

und betrachten den Fall ohne Verunreinigungen ($\rho = 0$) so folgt

$$\frac{Z(\omega_0)}{\lambda - \mu^* - \mu^* \alpha} = \ln\left(\frac{\omega_0}{T_{c0}}\right) \quad [134]$$

mit der Übergangstemperatur ohne Verunreinigungen T_{c0}. Damit kann [133] geschrieben werden als

$$\ln\left(\frac{T_{c0}}{T_c}\right) = \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\rho}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \quad [135]$$

Im Fall der schwach koppelnden Supraleiter werden dei Frequenzen nicht renormalisiert und $Z(\omega) = 1$, so daß [135] in den Abrikosov-Gorkov-grenzfall übergeht.(1) Der Fall starker Kopplung ohne Verunreinigung, der von McMillan (41) behandelt wurde, ist in [132] enthalten.

Im Vergleich zu den schwach koppelnden Supraleitern bedeutet die Renormalisierung des Paarbrechungsparameters ρ in [135] mit $[1+\lambda]^{-1}$, $0 \leq \lambda \leq 2$, daß die Reduktion der kritischen Temperatur durch Verunreinigungen langsamer verläuft

VI

Schluß

Die Untersuchungen der vorliegenden Arbeit haben verschiedene, auch für den Experimentalphysiker wichtige Ergebnisse geliefert. Es ist gelungen, den Einfluß von magnetischen Verunreinigungen im Kristallfeld auf den Supraleiter zu bestimmen. Neben dem Verhalten des Ordnungsparameters als Funktion der Temperatur und der Konzentration für verschiedene Niveauaufspaltungen ist die Wirkung der aufgespaltenen Niveaus der Verunreinigungen auf die Zustandsdichte besonders bemerkenswert. Das gestattet es, die Methode der Tunnelspektroskopie in Supraleitern zur Messung der Kristallfelder zu verwenden.
Weiter gestatten es die Ergebnisse dieser Arbeit, durch einfache Faltung der Zustandsdichte mit Fermifunktionen die spazifische Wärme zu berechnen und damit mit dem Experiment zu vergleichen.
Eine weitere wichtige Anwendung ist die Berechnung des kritischen Magnetfeldes, die über die Freie Energie wieder mit Faltung der Zustandsdichte mit tanh möglich ist.
Schließlich ist hinzuweisen auf das unerwartet einfache Ergebnis des Einflusses von Verunreinigungen auf stark koppelnde Supraleiter.

Figurenbeschreibung

1, 2, 3: Zustandsdichte des Supraleiters mit magnetischen Verunreinigungen für den Fall von 2 Singuletts.

4: wie 1, 2, 3, aber für den Fall $\Gamma_6 - \Gamma_8$

5, 6: Ordnungsparameter als Funktion der Temperatur für die Fälle: 2Singuletts und $\Gamma_6 - \Gamma_8$

7, 8, 9, 10, 11, 12: Ordnungsparameter als Funktion der Verunreinigungskonzentration für die Fälle: 2 Singuletts und $\Gamma_6 - \Gamma_8$

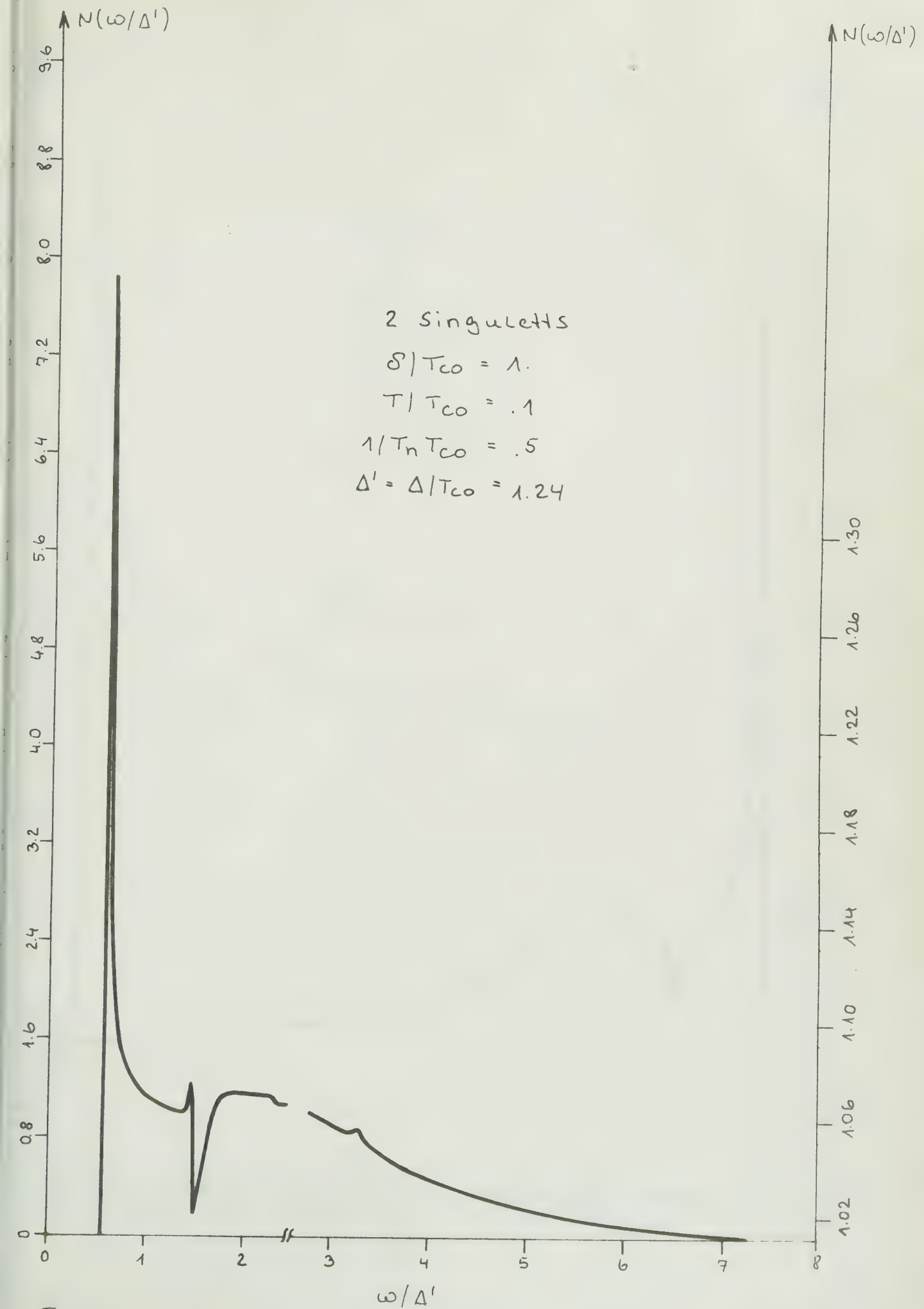

N(ω/Δ')
N(ω/Δ')
2 Singuletts
δ/Tco = 1.
T/Tco = .1
1/TnTco = .5
Δ' = Δ/Tco = 1.24
0
0.8
1.6
2.4
3.2
4.0
4.8
5.6
6.4
7.2
8.0
8.8
9.6
1.02
1.06
1.10
1.14
1.18
1.22
1.26
1.30
0
1
2
3
4
5
6
7
8
ω/Δ'

Fig. 1

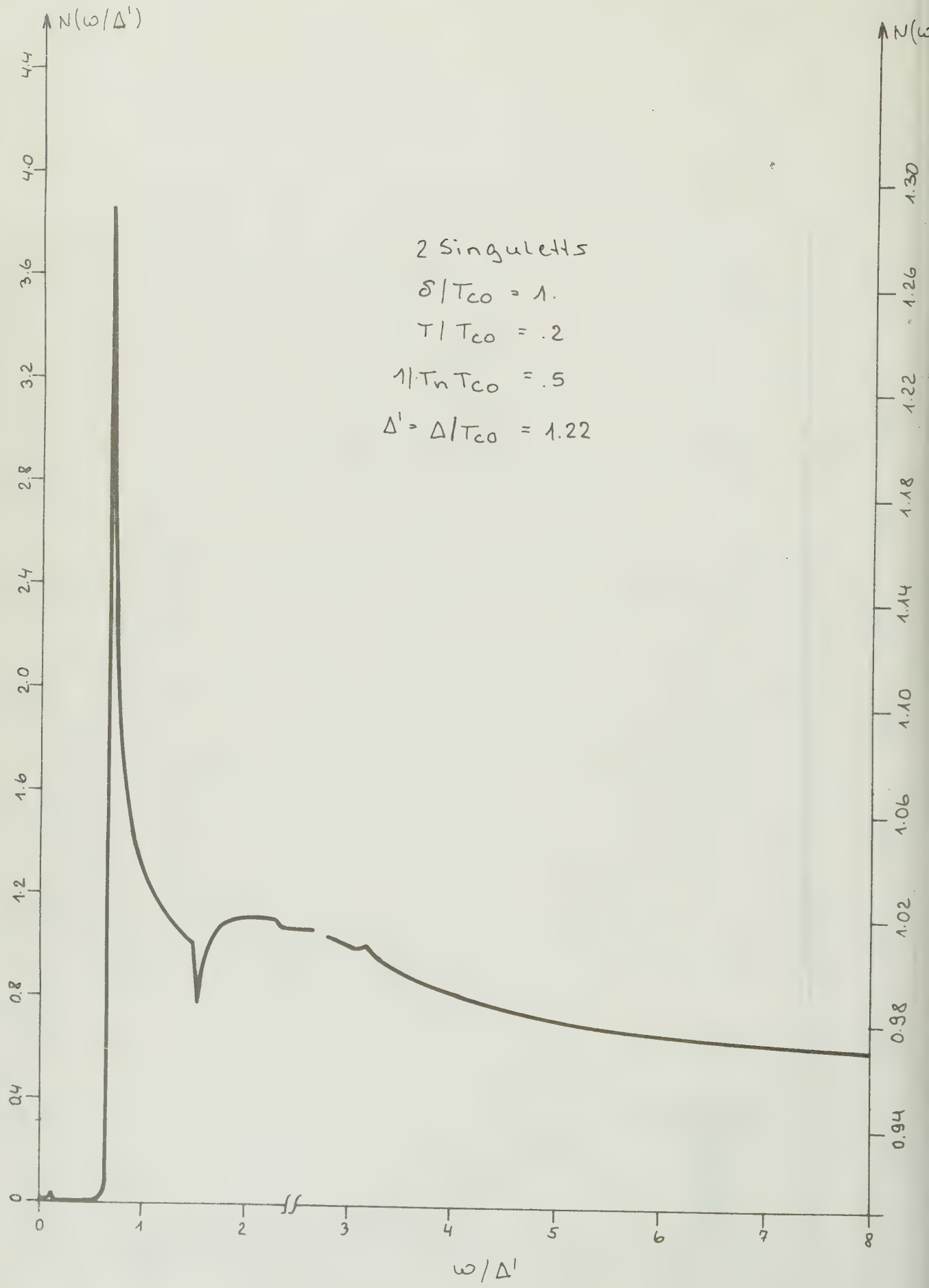
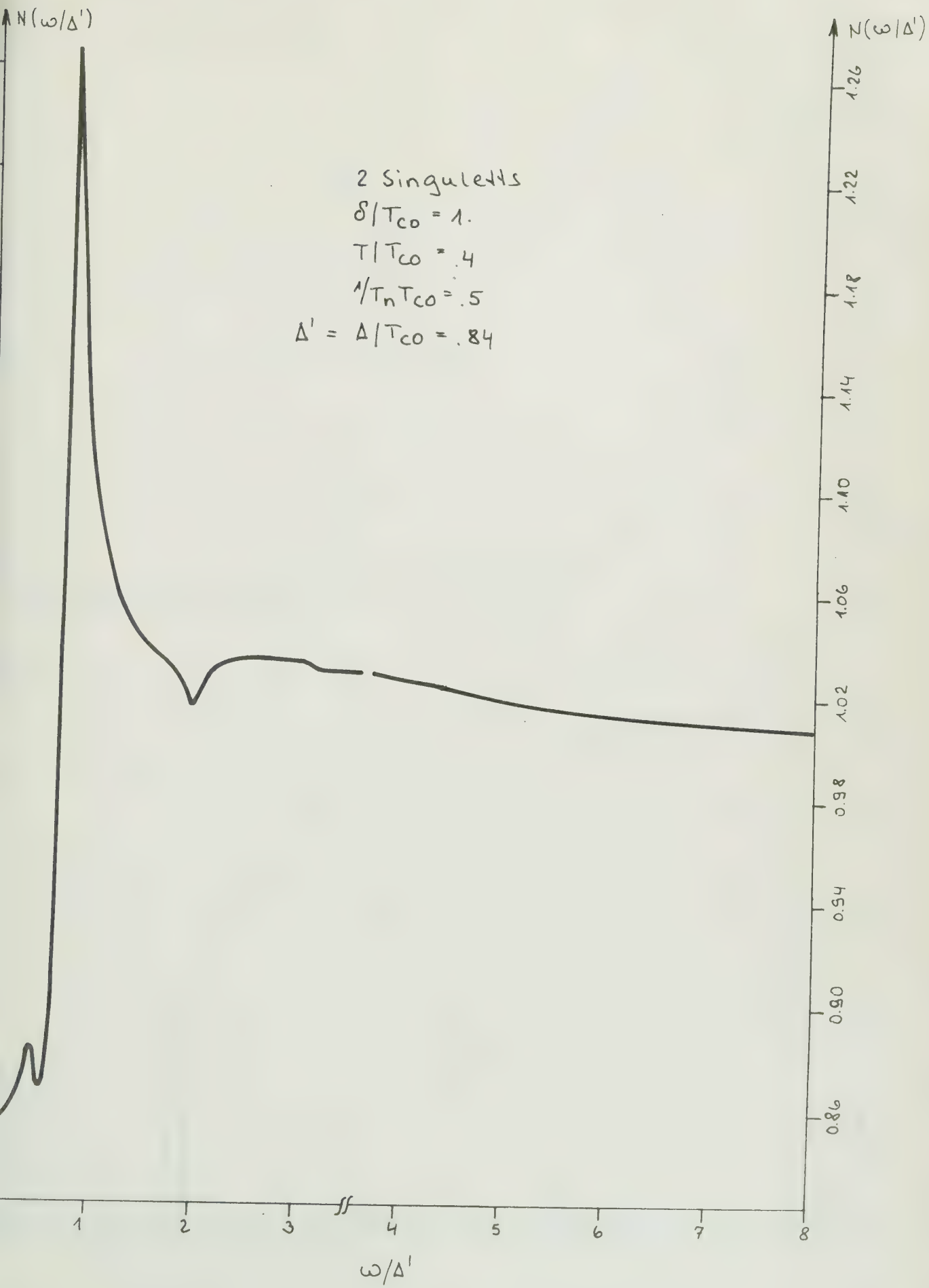

N(ω/Δ')
4.4
4.0
3.6
3.2
2.8
2.4
2.0
1.6
1.2
0.8
0.4
0
2 Singulets
δ/Tco = 1.
T/Tco = .2
1/TnTco = .5
Δ' = Δ/Tco = 1.22
N(ω
1.30
1.26
1.22
1.18
1.14
1.10
1.06
1.02
0.98
0.94
0
1
2
3
4
5
6
7
8
ω/Δ'

Fig. 2


N(ω/Δ')
N(ω/Δ')
2 Singulets
δ/T_CO = 1.
T/T_CO = .4
1/T_n T_CO = .5
Δ' = Δ/T_CO = .84
1.26
1.22
1.18
1.14
1.10
1.06
1.02
0.98
0.94
0.90
0.86
1
2
3
4
5
6
7
8
ω/Δ'

g. 3

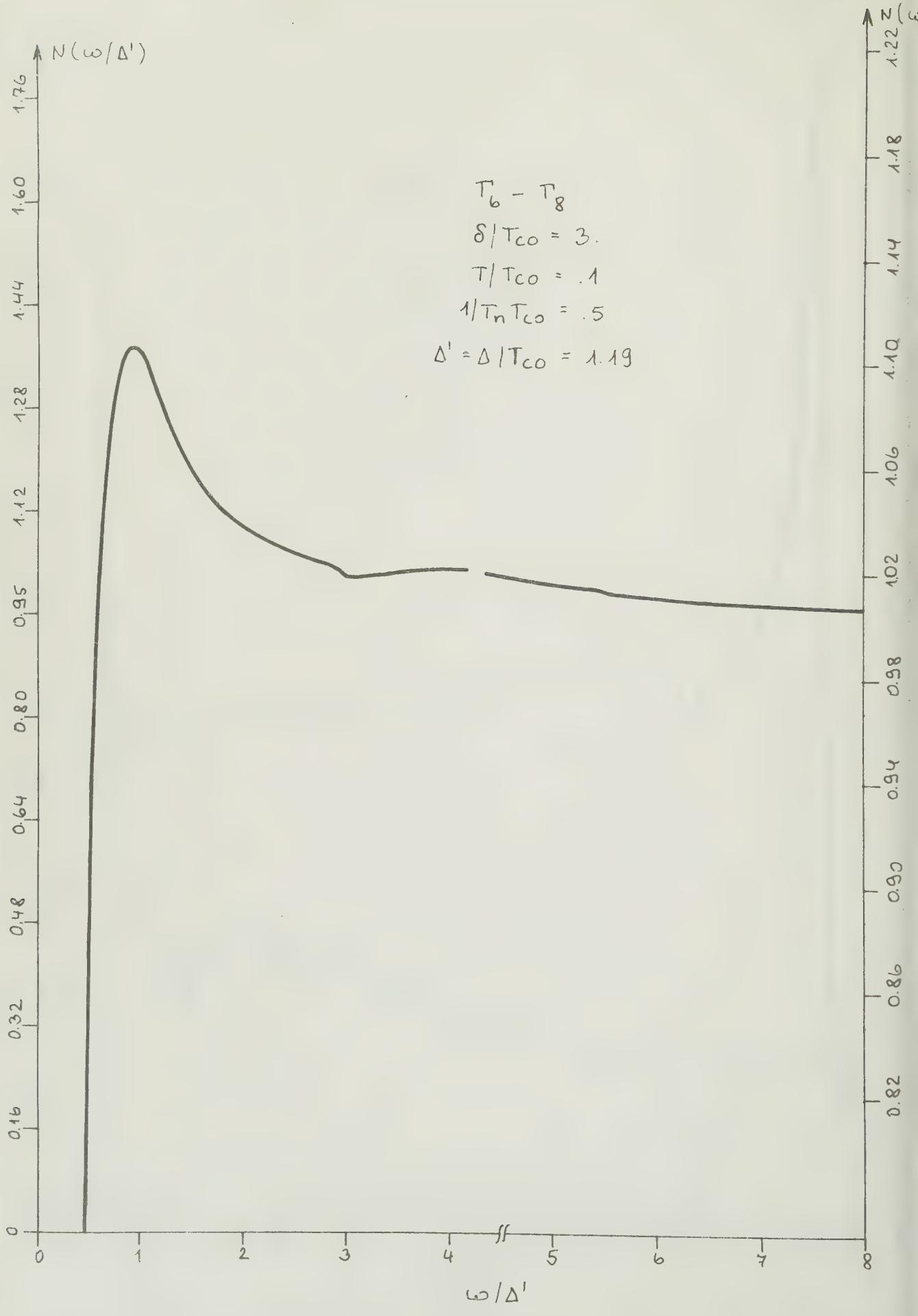

$N(\omega/\Delta')$
$T_6 - T_8$
$\delta/T_{co} = 3.$
$T/T_{co} = .1$
$1/T_n T_{co} = .5$
$\Delta' = \Delta/T_{co} = 1.19$
0
0.16
0.32
0.48
0.64
0.80
0.95
1.12
1.28
1.44
1.60
1.76
0.82
0.86
0.90
0.94
0.98
1.02
1.06
1.10
1.14
1.18
1.22
0
1
2
3
4
5
6
7
8
ω/Δ'

Fig. 4

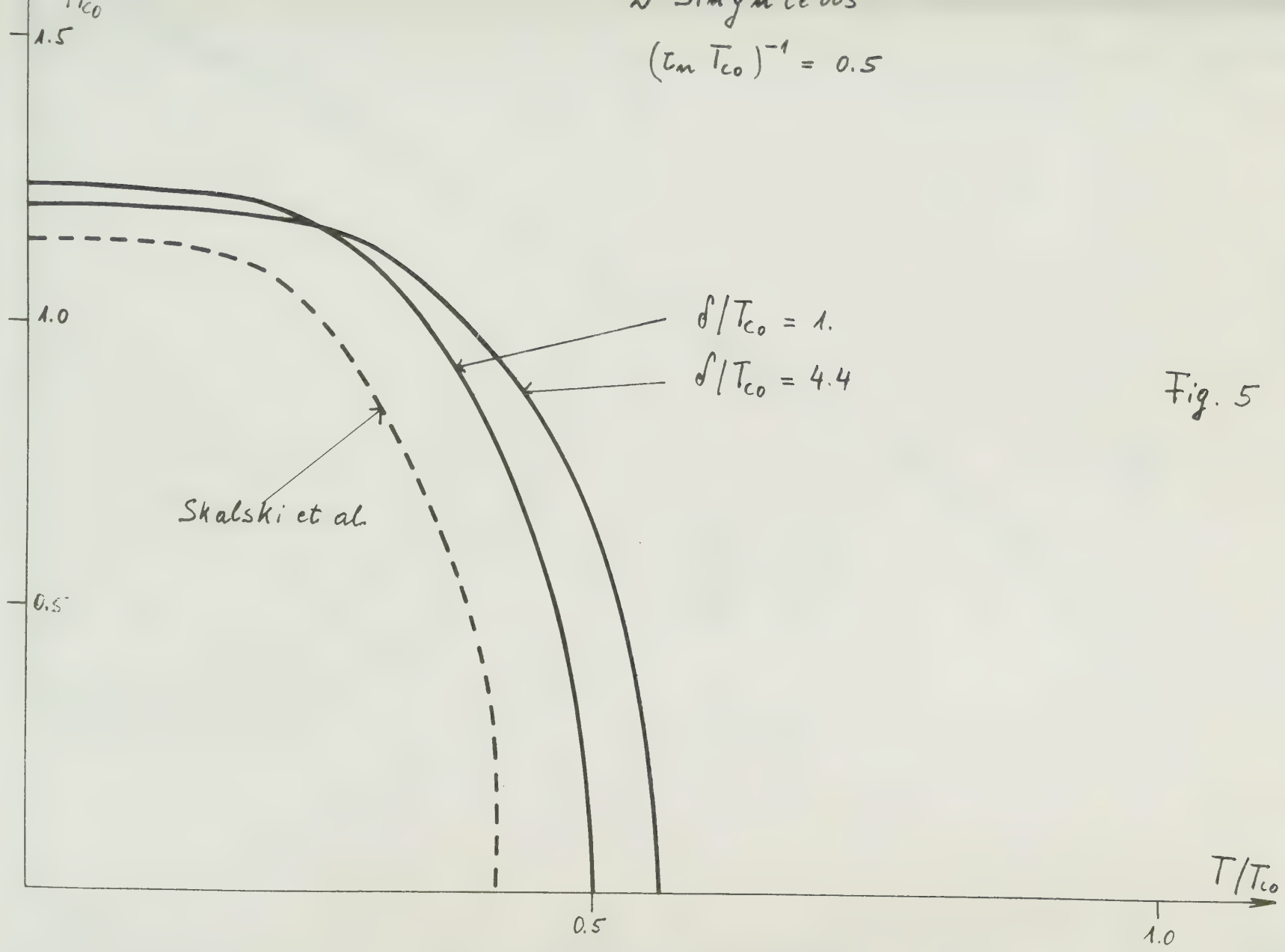

T_{c0}
1.5
1.0
0.5
$(\tau_m T_{c0})^{-1} = 0.5$
$\delta/T_{c0} = 1.$
$\delta/T_{c0} = 4.4$
Skalski et al.
0.5
1.0
T/T_{c0}

Fig. 5

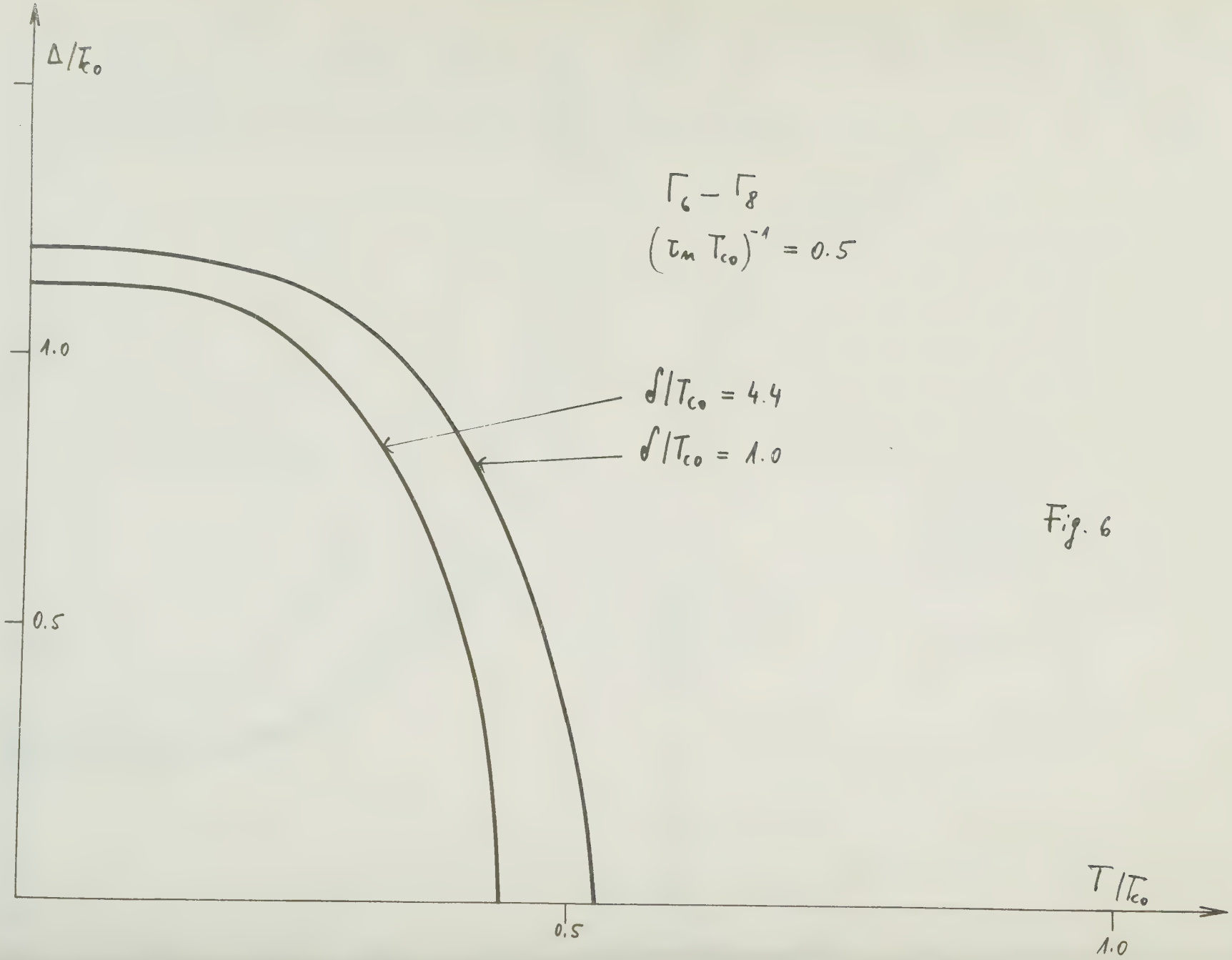

Δ/T_{c0}
$\Gamma_6 - \Gamma_8$
$(\tau_m T_{c0})^{-1} = 0.5$
1.0
$\delta/T_{c0} = 4.4$
$\delta/T_{c0} = 1.0$
0.5
T/T_{c0}
0.5
1.0

Fig. 6

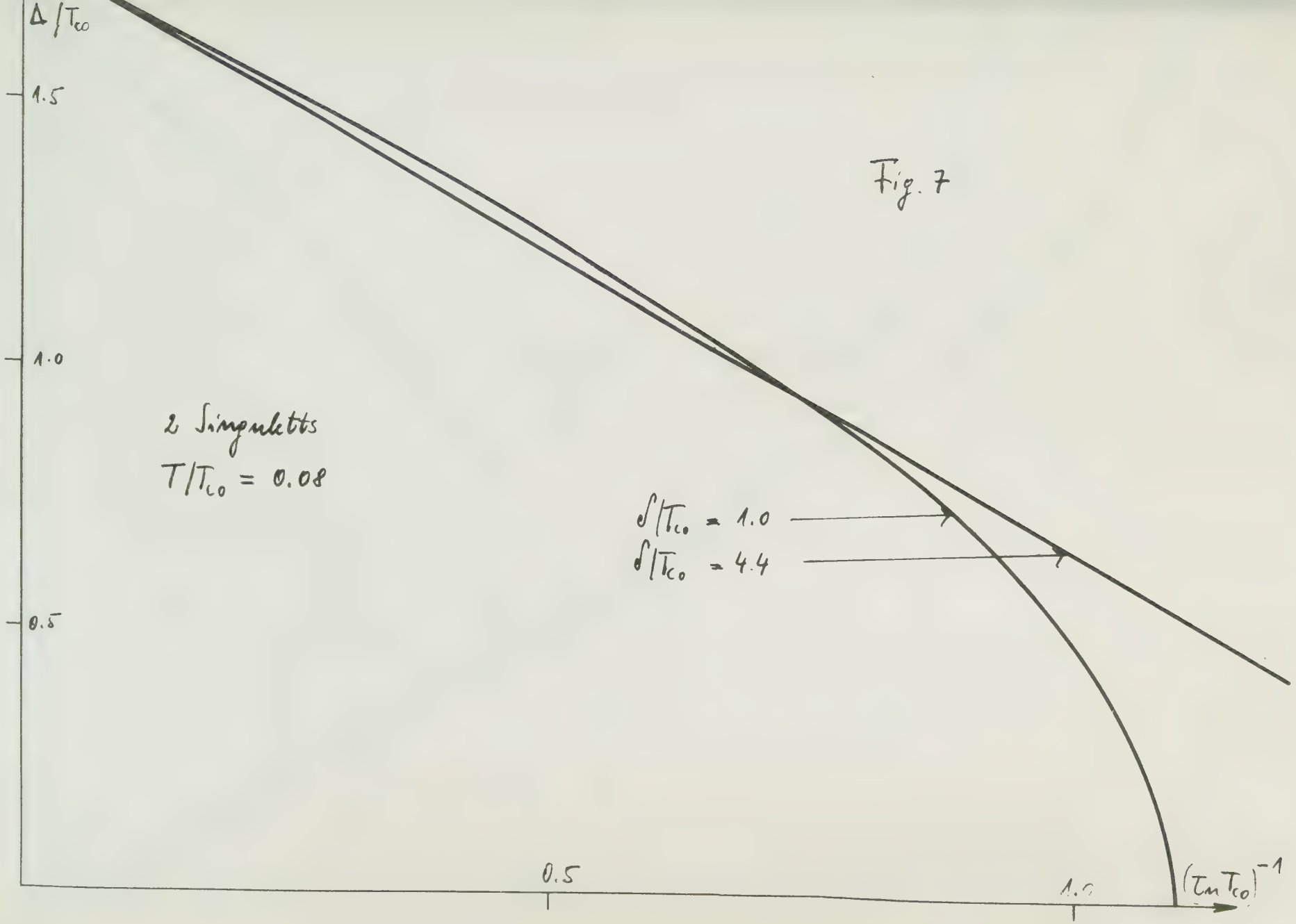

Δ/T_c0
1.5
1.0
0.5
2 Singuletts
T/T_c0 = 0.08
δ/T_c0 = 1.0
δ/T_c0 = 4.4
0.5
1.0
(τ_n T_c0)^-1

Fig. 7

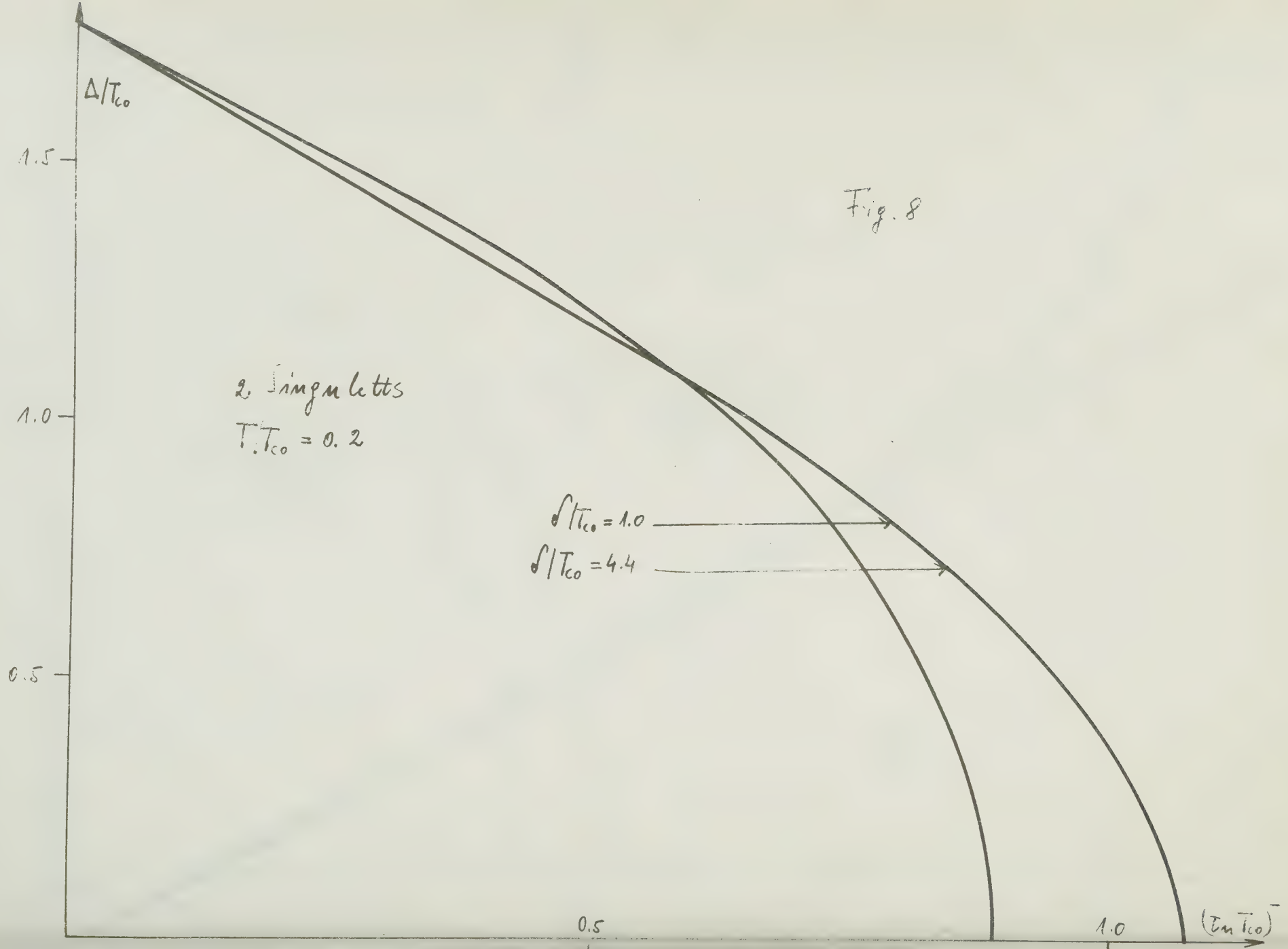


Fig. 8

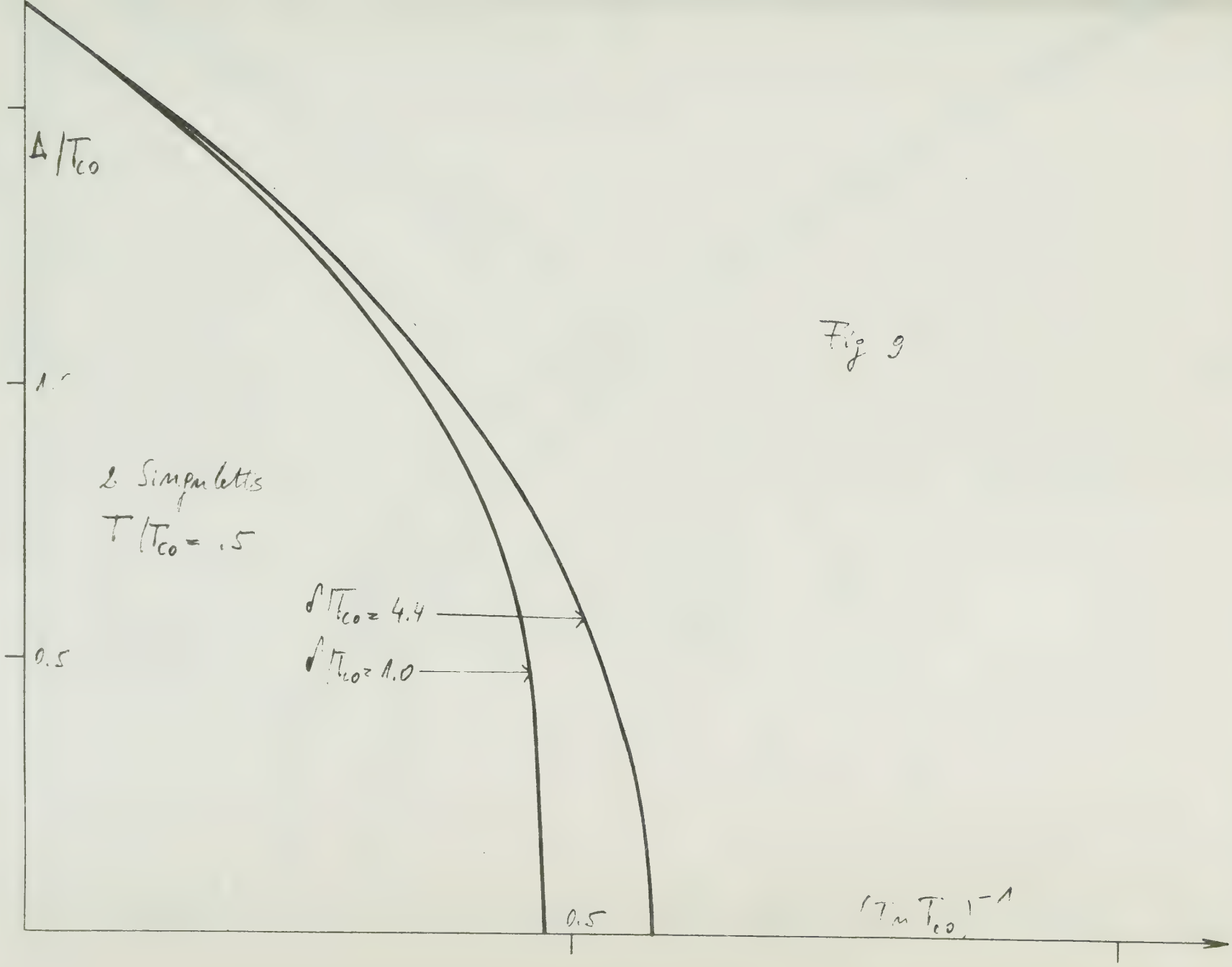


Fig 9

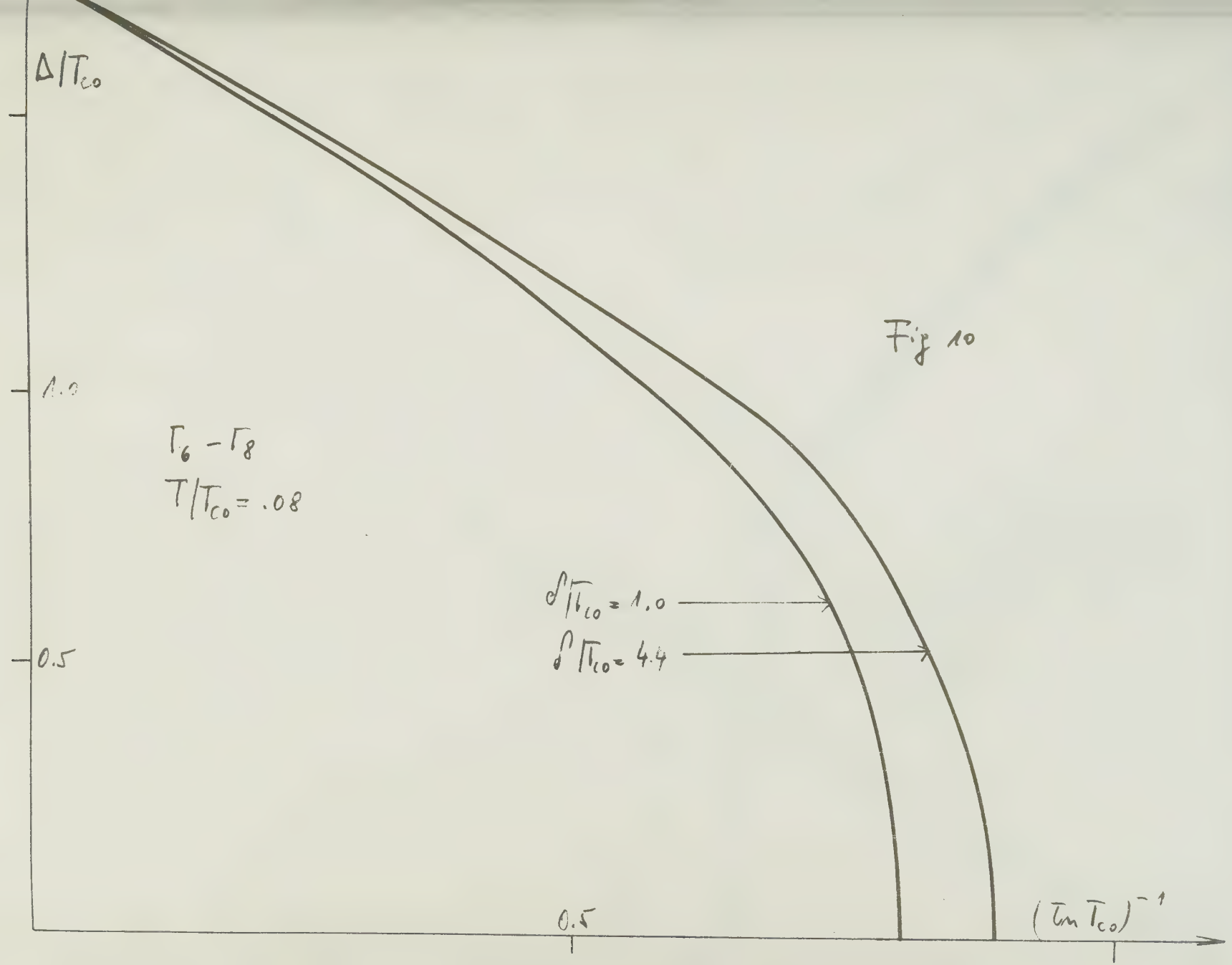


Fig 10

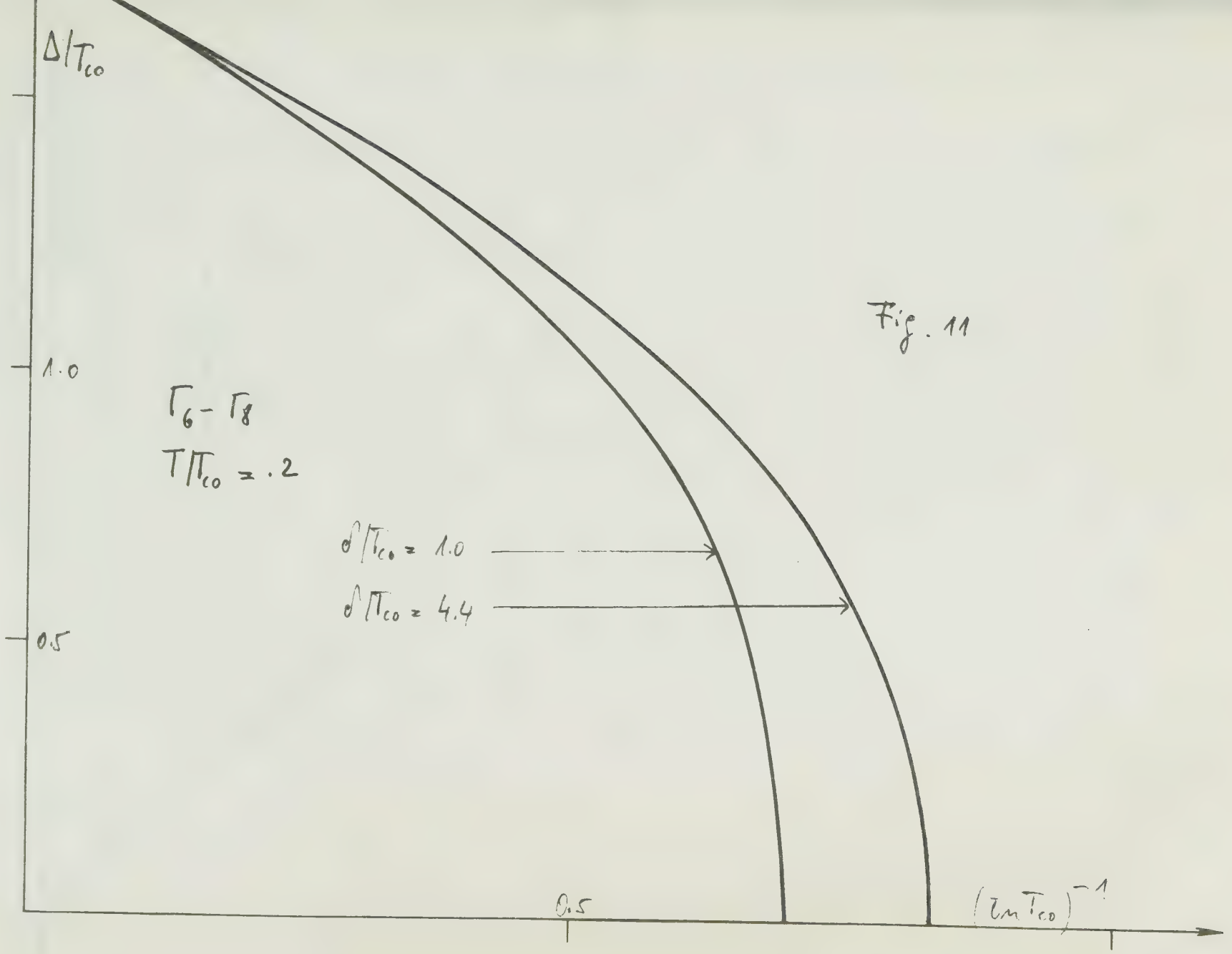

Δ/T_{c0}
1.0
0.5
$\Gamma_6 - \Gamma_8$
$T/T_{c0} = .2$
$\delta/T_{c0} = 1.0$
$\delta/T_{c0} = 4.4$
0.5
$(\tau_m T_{c0})^{-1}$

Fig. 11

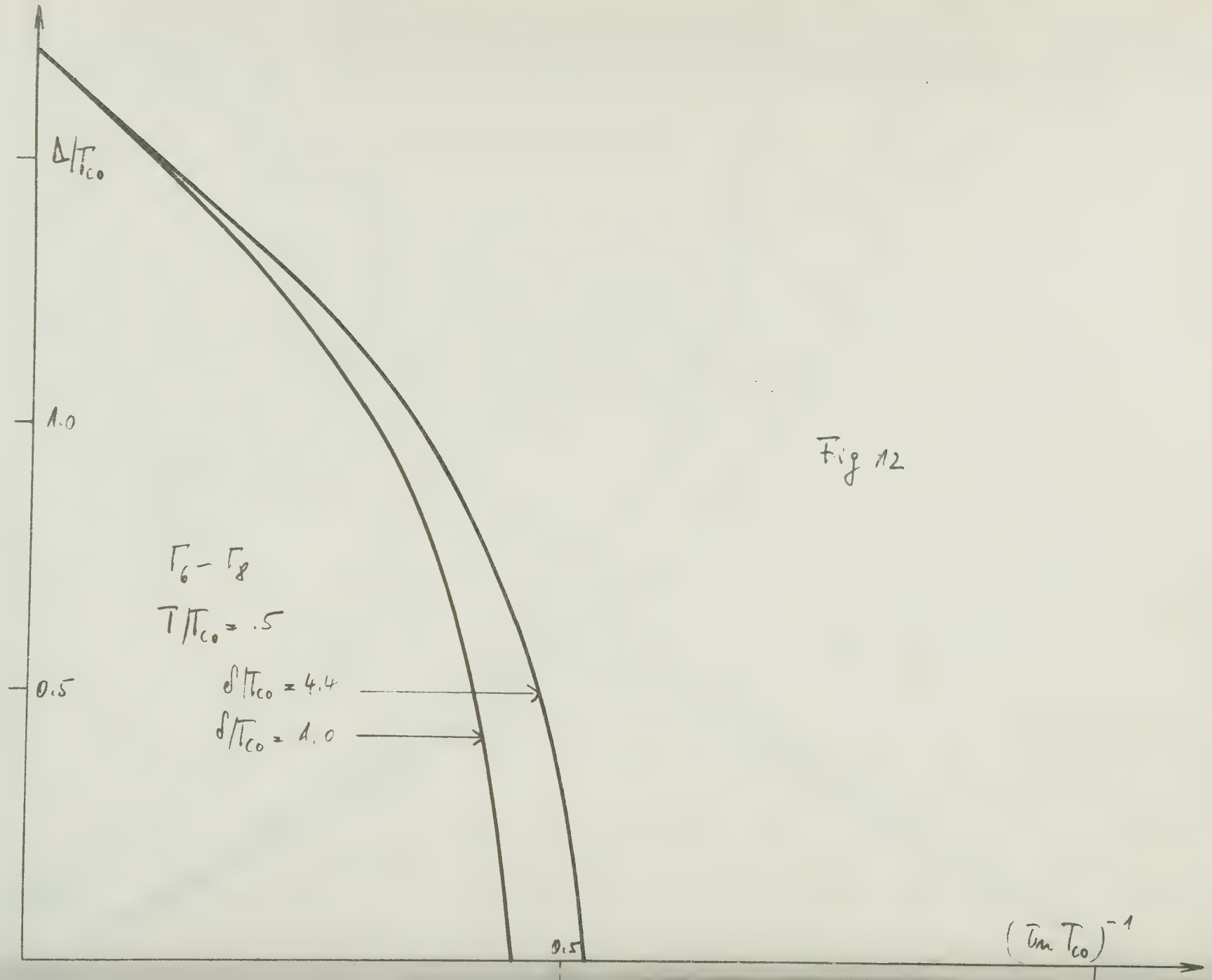


Fig 12

Literaturverzeichnis

(1) A.A.Abrikosov, L.P.Gorkov, Zh.Eksperim. i teor Fiz. 39, 1781 (196o) (sov.Phys.JETP 12, 1243 (1961))

(2) P.Fulde, Sol. State Comm. 5, 181 (1967)

(3) P.Fulde in Tunneling phenomena in Solids, Plenum Press (1969) chapter 29

(4) K.Maki in Superconductivity, R.D.Parks editor, M.Dekker inc. (1969) pg.1o35

(5) P.Fulde, L.Hirst, A.Luther, Z. Phys. 23o,155,(197o)

(6) J.Keller, P.Fulde, J.low Temp.Phys.4,289,(1972)

(7) J.R.Schrieffer in Theory of Superconductivity, New York, w.a.Benjamin inc. (1964)

(8) D.J.Scalapino, J.R.Schrieffer, J.W.Wilkins, Phys.Rev.148,263,(1966)

(9) W.L.McMillan, J.M.Rowell in Superconductivity, R.D.Parks editor, M.Dekker inc. (1969), pg.561

(1o) S.Skalski, O.Betbeder Matibet, P.R.Weiss, Phys.Rev.136, A15oo, (1966)

(11) D.K.Finnenmore,D.E.Mapother,R.W.shaw, Phys. Rev.118,127,(196o)

(12) N.E.Philipps,Phys.Rev.114,676,(1959)

(13) D.J.Scalapino in Superconductivity,R.D.Parks editor,M.Dekker inc.(1969),pg.449

(14) N.Barth,Habilitationsschrift,Universität Frankfurt(1971)

(15) K.Knorr,N.Barth, J.Low Temp.Phys.4,469,(1971)

(16) K.Knorr,Thesis,Universität Frankfurt(197o)

(17) G.H.Dieke:Spectra and Energy levels of Rare Earth ions in Crystals(1968),John Wiley&Sons inc.

(18) A.Abragams, B.Bleaney:Electron Paramagnetic Resonance of Transition ions,Clarendon Press, Oxford(197o)

(19) E.P.Wigner, Group Theory, Academic Press, New York (1959)

(2o) M.Tinkham:Group Theory and Quantum Mechanics McGraw Hill, New York (1964)

(21) R.S.Knox,A.Gold,Symmetry in the Solid State W.A.Benjamin inc.,New York (1964)

(22) C.M.Herzfield,H.E.Meijer:Group Theory and Crystal Field Theory in F.Seitz and D.Turnball, Editors,Solid State Physics Advances in Research and Applications,Vol.14,Academic Press,New York

(23)K.R.Lea,M.J.M.Leask,W.P.wolf,J.phys.Chem.Sol.23, 1381,(1962)

(24) D.Cribier,B.Jacrot,C.r.hebd.Sèanc.acad.Sci.Paris, 25o,2851,(196o)

(25) B.D.Rainford,K.C.Tuberfield,G.Busch,O.Vogt, J.Phys.C,1,679,(1968)

(26) R.I.Birgenau,E.Bucher,L.Passell,D.L.Price, K.C.Tuberfield,J.appl.Phys.41,9oo,(197o)

(27) K.C.Tuberfield,L.Passell,R.J.Birgenau,E.Bucher, Phys.Rev.Lett.25,752,(197o)

(28) E.Bucher,K.Andres,J.P.Maita,G.W.Hull,Helv. phys.Acta41,723,(1968)

(29) P.Fulde,I.Peschel,Adv.in Physics21,1,(1972)

(3o) I.Peschel, Dissertation, Universität Frankfurt (197o)

(31)A.A!Abrikosov,Physics 2,5,(1965)

(32) C.B.Duke,S.D.Silverstein,Phys.Rev. 161,456,(1967)

(33)H.Keiter,Z.Physik 213,466,(1968)

(34) Y.Nambu, Phys.Rev.117,648,(196o)

(35) A.A.Abrikosov,L.P.Gorkov,I.E.Dzyaloshinsky, Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics,Prentice Hall (1963)

(36) P.Roman, Advanced Quantum Theory,Addison-Wesley publishing comp.inc.(1965),Teil 3-4 on dispersion relations und Appendix

(37) G.A.Baker Jr.,J.L.Gammel,editors,The Padé Approximant in Theoretical Physics, Vol 71 of Mathematics

in science and engineering, Academic Press(1970)
(38) J.Keller, private Mitteilung
(39) A.B.Migdal, Soviet Phys.JETP 1,966,(1958)
(40) D.Markowitz,L.P.Kadanoff, Phys.Rev. 131,563,(1963)
(41) W.L.McMillan,Phys.Rev. 167,331,(1968)

Meinem Lehrer, Herrn Prof. Dr. P. Fulde danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit und für viele wichtige Hinweise.
Besonders danken möchte ich auch Herrn Prof. Dr. J. Keller für viele Diskussionen und wertvolle Anregungen.
Herrn Prof. Dr. H. Thomas danke ich für seine stete und hilfreiche Anteilnahme an dieser Arbeit.
Großen Dank schulde ich allen meinen Kollegen, insbesondere Herrn Dr. I. Peschel, Dipl.Phys. R. Kragler und Dipl.Phys. F.P. Kaufmann für zahlreiche Diskussionen.
Für das Interesse an dieser Arbeit und viele Gespräche danke ich den Herren Dr. N. Barth, Dr. K. Knorr, Dr. E. Hoenig und Herrn Dipl.Phys. W. Happel.
Weiter gebührt mein Dank Frau Boffo für das Schreiben und Herrn Brose für das Drucken dieser Arbeit.
Schließlich danke ich dem Zentralen Recheninstitut der Universität Frankfurt, das die Rechenzeit zur Verfügung stellte.

L e b e n s l a u f

Ich wurde geboren am 25. 12. 1937 in Sexten, Südtirol, Italien als Sohn des Landarbeiters Peter Holzer und seiner Frau Anna. Nach dem Besuch des Gymnasiums im Internat Vincentinum in Brixen legte ich 1956 die Reifeprüfung ab.
Danach studierte ich 1 Semester in Wien und 2 Semester in Marburg das Fach Physik.
Aus finanziellen Gründen unterbrach ich dann das Studium bis zum Sommersemester 1964, in dem ich das Studium an der Frankfurter Universität neu begann.
1966 bestand ich die Vordiplomprüfung in Frankfurt. Die Diplomarbeit bei Prof. Dr. W. Greiner befaßte sich mit dem Zweizentrenmodell und seiner Anwendung auf die Kernspaltung.
Nach der Diplomprüfung im Jahre 1969 wurde ich Mitarbeiter von Prof. Dr. P. Fulde am Institut für Theoretische Physik in Frankfurt.

Meine akademischen Lehrer waren:
Behrens, Bilz, Dänzer, Doiwa, Franz, Fulde, Greiner, Koethe, Moufang, Martienssen, Mrowka, Schopper, Süssmann, Thomas, Wieland.